

UNIVERSITÉ DU QUÉBEC

MÉMOIRE PRÉSENTÉ À
L'UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À TROIS-RIVIÈRES

COMME EXIGENCE PARTIELLE
DE LA MAÎTRISE EN PHYSIQUE

PAR
SAMUEL LEMAY

SOLUTION ANALYTIQUE DE L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER POUR UN
POTENTIEL COULOMBIEN-PLUS-LINÉAIRE :
LES ÉNERGIES PROPRES

AOÛT 2018

Université du Québec à Trois-Rivières

Service de la bibliothèque

Avertissement

L'auteur de ce mémoire ou de cette thèse a autorisé l'Université du Québec à Trois-Rivières à diffuser, à des fins non lucratives, une copie de son mémoire ou de sa thèse.

Cette diffusion n'entraîne pas une renonciation de la part de l'auteur à ses droits de propriété intellectuelle, incluant le droit d'auteur, sur ce mémoire ou cette thèse. Notamment, la reproduction ou la publication de la totalité ou d'une partie importante de ce mémoire ou de cette thèse requiert son autorisation.

Avant-propos

Je tiens à remercier, dans un premier temps, mon directeur de recherche, le professeur Adel F. Antippa pour son enseignement rigoureux et exceptionnel, sa sagesse et la confiance qu'il m'a accordée tout au long de mes études. Je lui suis également très reconnaissant de m'avoir transmis sa passion pour la physique ainsi que de m'avoir montré l'essence même d'un physicien.

J'aimerais également remercier les professeurs Pierre Bénard qui, par son enseignement et son esprit exceptionnel, devint un modèle et une source d'inspiration, Alfred Michel Grundland pour m'avoir fourni un bagage mathématique hors du commun, Jacques Goyette pour sa patience et le temps qu'il m'a investi et Louis Marchildon pour ses explications d'une clarté exceptionnelle de notions avancées.

Je remercie aussi Sonny Larouche dont la bonne humeur est contagieuse, Martin Picard Thompson le meilleur partenaire de travail qu'il fut possible d'avoir, Anthony Haydock pour son humour sans fin, Pierre-Olivier Parisé pour le partage de sa passion inconditionnelle des mathématiques, Marc-Antoine Pagé pour son soutien constant, Benjamin Dupuis pour nos longues conversations enrichissantes, David Durette pour son support dans le domaine informatique, Pascal Lefebvre pour son aide dès le premier jour et Sébastien Bertrand pour les nombreux conseils.

Enfin, je voudrais aussi accorder une mention spéciale à ma famille qui m'a encouragée tout au long de mes études. Finalement, je tiens à remercier Audrey Dufresne pour avoir été patiente, attentionnée et être restée à mes côtés lors de ce projet.

Grâce à votre soutien, ce défi fut beaucoup plus facile à surmonter.

Samuel Lemay, 2018.

Résumé

Le potentiel coulombien-plus-linéaire est utilisé pour la description du système quark-antiquark, mais les valeurs propres d'énergies qui y sont associées sont encore à ce jour inconnues analytiquement. Ceci est lié au fait que la résolution de l'équation de Schrödinger radiale pour le potentiel coulombien-plus-linéaire par la méthode de Frobenius mène à une équation de récurrence linéaire et homogène à quatre termes entre les différents coefficients du développement en série. La solution de ce type d'équation s'exprime à l'aide de fonctions combinatoires qui sont définies sur l'ensemble des partitions ordonnées d'un intervalle. Ces fonctions permettent d'exprimer la valeur d'un coefficient comme une combinaison linéaire d'autres coefficients. Cependant, les fonctions propres associées au potentiel coulombien-plus-linéaire ne sont pas forcément normalisables. La normalisation sera seulement possible pour un ensemble discret de valeurs d'énergie. Pour trouver ces valeurs, on exige que la fonction radiale possède le bon comportement asymptotique et on lie cette condition à l'infini avec la condition à l'origine par le biais des fonctions combinatoires. On obtient alors une contrainte sur l'énergie prenant la forme d'une fonction polynomiale de degré infini tel que les racines sont reliées aux énergies propres.

Samuel Lemay

Adel F. Antippa, Ph. D.

© Samuel Lemay, 2018

Abstract

The Coulomb-plus-linear potential is used to describe the quark-antiquark system, but the associated energy spectrum is still analytically unknown. This is linked to the fact that solving the radial Schrödinger equation for the Coulomb-plus-linear potential with the Frobenius method leads to four-term linear and homogeneous recursion relation linking the different coefficients of the series solution. Solution to this type of equation is given in terms of combinatorics functions which are defined on the set of all different ordered partitions of an interval. These functions let us express the value of one coefficient as a linear combination of others. However, the eigenfunctions associated with the Coulomb-plus-linear potential aren't necessarily normalizable. The normalization will only be feasible for a discrete set of energy values. To find those values, we force the radial function to have the proper asymptotic behaviour and we link this condition at infinity to the condition at the origin with the help of combinatorics functions. We then obtain a constrain on the different values of energy given by the root of an infinite order polynomial.

Table des matières

Avant-propos	iii
Résumé	v
Abstract	vii
Table des matières	ix
Liste des tableaux	xiii
Liste des figures	xv
Liste des notations	xvii
1 Introduction	1
2 Les fonctions propres	7
2.1 Équation radiale	7
2.2 Résolution de l'équation de récurrence	9
2.3 Fonctions propres	12
2.4 Comportement asymptotique	13
2.5 Conditions frontières	14
2.5.1 Condition à l'origine	15
2.5.2 Condition à l'infini	15
3 Équation de récurrence	19
3.1 Inversion de l'équation de récurrence	19

3.2	Les fonctions combinatoires	20
3.2.1	Partitions	21
3.2.2	Construction des fonctions combinatoires	24
3.3	La somme sur r	27
3.4	Solution de l'équation de récurrence	29
4	Fonction de structure conjuguée	31
4.1	Cas fondamentaux	33
4.1.1	Partition de longueur nulle	34
4.1.2	Partition composée de part de longueur 1 ou 2	34
4.1.3	Partition composée de part de longueur 3	35
4.2	Équations de récurrence pour les fonctions de structure	36
4.2.1	Équations de récurrence linéaires	36
4.2.2	Équation de récurrence non linéaire	38
5	Les énergies propres	47
5.1	Contrainte sur l'énergie	47
5.2	Cas spécial du potentiel linéaire ($\rho = 0$) sans moment cinétique ($l = 0$)	52
5.3	Résultats numériques	56
	Conclusion	61
	Bibliographie	65
A	Méthodologie	67
A.1	Introduction	67
A.2	Partitions	68
A.3	Opérations et ensembles de partitions	71
A.4	Transition vers les fonctions combinatoires	75
A.5	Solution de l'équation de récurrence inversée	79
A.6	Conclusion	80
B	Symboles de Pochhammer	83

Liste des tableaux

5.1	Tableaux des valeurs de $\beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1)$ pour $n = 0, 1, 2$	57
5.2	Tableau des valeurs des coefficients $K_r^{(N)}(0.05, 0)$ pour différentes valeurs de N	58
A.1	Vecteurs $\Delta_n^q(m)$ et $S_n^q(m_2, m_1)$ associés aux partitions de l'intervalle $[8, 15]$ en parts appartenant à $\{2, 3, 5\}$	71

Liste des figures

1.1	Représentation de la forme des potentiels coulombien, linéaire et coulombien-plus-linéaire.	3
3.1	Exemples de partitions ordonnées de l'intervalle $[1, 11]$ en parts de longueur 1, 2 et 3.	21
3.2	Inversion de deux parts de longueurs différentes dans une partition. . .	24
4.1	Représentation des partitions de l'ensemble T_i	39
4.2	Représentation des partitions de l'ensemble $\mathcal{S}_{p_1}^{p'_2, p'_3}(m_2, m_1, n)$	43
5.1	Représentation graphique de $H_0(0, t)$	55
5.2	Courbes générées par les (a) 5, (b) 6, (c) 7, (d) 9 premières puissances de t	59
A.1	Partitions de l'intervalle $[8, 15]$ en parts incluses dans l'ensemble $\{2, 3, 5\}$. .	70
A.2	Représentation des vecteurs $\Delta_3^1(s_3 - s_0)$ et $S_3^1(s_3, s_0)$	71
A.3	Représentation graphique de l'équation (A.9).	71
A.4	Décomposition de la partition $o_3^1(15, 8)$	72

Liste des notations

Symbole	Description
$V(r)$	Potentiel (J)
V_0	Terme constant du potentiel coulombien-plus-linéaire (J)
κ	Coefficient de la partie linéaire du potentiel coulombien-plus-linéaire (J/m)
α	Coefficient de la partie coulombienne du potentiel coulombien-plus-linéaire (J·m)
μ	Masse réduite du système quark-antiquark (kg)
E_{nl}	Valeur d'énergie propre du système (J)
n	Nombre de parts d'un intervalle (également nombre quantique total pour les indices de E_{nl} , t_{nl} et u_{nl})
l	Nombre quantique orbital
m	Longueur d'une partition (également nombre quantique azimutal pour l'indice de $Y_l^m(\theta, \phi)$)
$\psi_{nlm}(\vec{r})$	Fonction d'onde
$Y_l^m(\theta, \phi)$	Harmonique sphérique
$u_{nl}(r)$	Solution de l'équation de Schrödinger radiale
ρ	Constante de couplage
t_{nl}	Paramètre représentant l'énergie du système
b_m	Coefficient du développement en série de $u_{nl}(r)$
λ_0	Condition initiale de l'équation récursive ($b_0 = \lambda_0$)
γ_0	Constante de proportionnalité entre $u_{nl}(x)$ et $\text{Ai}(x - t_{nl})$ dans la limite où x tend vers l'infini

a_i	Coefficient du développement en série centré à 0 de la fonction d'Airy de première espèce
\mathcal{A}	Ensemble des parts
p_i	Nombre de parts de longueur i
ν	Paramètre permettant de fixer les valeurs de p_2 et p_3
δ_i	i^{e} part d'une partition
$\Delta_n^q(m_2, m_1)$	Vecteur des parts de la q^{e} partition en n parts de l'intervalle $[m_1, m_2]$
s_i	Position de la fin de la i^{e} part d'une partition
$S_n^q(m_2, m_1)$	Vecteur des positions de la q^{e} partition en n parts de l'intervalle $[m_1, m_2]$
$G_n^q(m_2, m_1)$	Fonctionnelle de la q^{e} partition en n parts de l'intervalle $[m_1, m_2]$
$g_i(m, l)$	Coefficient de l'équation de récurrence inversée
$g'_i(m, l)$	Coefficient $g_i(m, l)$ modifié tel que $g'_3(m, l) = g_3(m, l)$ et $g'_j(m, l) = 1, j \in \{1, 2\}$
$C_1^*(m_2, m_1, n)$	Fonction combinatoire spéciale conjuguée de première espèce
$C_2^*(m_2, m_1)$	Fonction combinatoire spéciale conjuguée de seconde espèce
$\bar{C}_1^*(m_2, m_1, n)$	Fonction combinatoire contrainte conjuguée de première espèce
$\bar{C}_2^*(m_2, m_1)$	Fonction combinatoire contrainte conjuguée de seconde espèce
$\mathcal{N}(m), \mathcal{N}(m, d)$	Ensemble des valeurs de n possibles pour un intervalle de longueur m , (tel que la première part est supérieure à d)
$\mathcal{Q}(m, n, d)$	Ensemble des valeurs de q possibles pour une partition en n parts d'un intervalle de longueur m , tel que la première part est supérieure à d
$\mathcal{O}(m_2, m_1)$	Ensemble des partitions de l'intervalle $[m_1, m_2]$
$\mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1)$	Ensemble des partitions de l'intervalle $[m_1, m_2]$ avec p_1 parts de longueur 1

$\mathcal{O}_{p_1, \nu}(m_2, m_1)$	Ensemble des partitions de l'intervalle $[m_1, m_2]$ avec les valeurs p_1 et ν
$\mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1, n)$	Ensemble des partitions de l'intervalle $[m_1, m_2]$ en n parts avec p_1 parts de longueur 1
$\beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1)$	Fonction de structure conjuguée
$H_l(t_{nl})$	Polynôme de t_{nl}
$H_l^{(N)}(t_{nl})$	Suite convergente vers $H_l(t_{nl})$
$K_r(l)$	Coefficient des puissances de t_{nl} dans $H_l(t_{nl})$
$K_r^{(N)}(l)$	Suite convergente vers $K_r(l)$
$\mathcal{T}(m_2, m_1, n)$	Ensemble des partitions de l'intervalle $[m_1, m_2]$ en n parts avec $p_1 = 0$
$\mathcal{T}_i(m_2, m_1, n)$	Ensemble des partitions de l'intervalle $[m_1, m_2]$ en n parts avec $p_1 = 0$, tel que les i dernières parts sont de longueur 3 et que la $(n - i)^e$ est de longueur 2
$S_{p_1}^{p'_2, p'_3}(m_2, m_1, n)$	Ensemble des partitions de l'intervalle $[m_1, m_2]$ en n parts, tel que les $(p'_2 + p'_3)$ dernières parts ne sont pas de longueur 1, possèdent une longueur totale de $(2p'_2 + 3p'_3)$ et tel que la $(n - p'_2 - p'_3)^e$ part est de longueur 1

Chapitre 1

Introduction

L'arrivée de la mécanique quantique a apporté un regard nouveau sur plusieurs aspects de la physique. L'un de ces aspects est la discrétisation de l'énergie. En effet, pour plusieurs systèmes physiques, le spectre d'énergie ne forme pas un continuum, mais bien un ensemble discret de valeurs. La façon de discrétiser l'énergie provient de considérations physiques que l'on impose sur la fonction d'onde d'un système. Une de ces considérations est d'imposer que le carré de la fonction d'onde, c'est-à-dire la densité de probabilité, soit normalisable pour les systèmes liés. Étant donné qu'il n'existe seulement qu'un spectre discret de valeurs d'énergies permettant de normaliser la densité de probabilité, ce seront ces dernières qui seront physiquement acceptables.

Le problème de la détermination des valeurs propres associées à un certain potentiel peut facilement devenir très complexe et seulement un très faible nombre de potentiels ont été résolus analytiquement. Parmi ceux-ci, on compte le potentiel coulombien, le potentiel quadratique et depuis 1978 le potentiel linéaire [1]. L'objectif de ce mémoire est de développer une équation permettant de trouver le spectre d'énergie

associé au potentiel coulombien-plus-linéaire donné par

$$V(r) = V_0 + \kappa r - \frac{\alpha}{r}. \quad (1.1)$$

Le potentiel coulombien-plus-linéaire, aussi connu sous le nom de potentiel de Cornell, est utilisé en tant que potentiel phénoménologique qui sert à modéliser les interactions entre quarks, et plus précisément pour décrire l'interaction dans le système quark-antiquark (quarkonium), tels le charmonium et le bottomonium [2, 3, 4, 5, 6]. Ce potentiel sert également à modéliser d'autres systèmes physiques. Notamment, il est utilisé dans la description de l'effet Stark radial pour l'atome d'hydrogène [7] et le plasma quark-gluon (QGP) [8, 9].

Ce potentiel consiste en un potentiel coulombien auquel on ajoute un terme linéaire. La partie coulombienne modélise l'interaction à courte portée, alors que le terme linéaire garantit le confinement des quarks en étant dominant à longue distance. La forme des potentiels coulombien, linéaire et coulombien-plus-linéaire est représentée sur la figure 1.1.

Le potentiel de coulombien-plus-linéaire a été étudié par le biais de nombreuses techniques et également comme un cas particulier du potentiel de Kilingbeck $V(r) = -a/r + br + cr^2$ lorsque $c = 0$.

Seetharaman *et al.* [10] ont utilisé l'approximation de WKB pour obtenir une approximation analytique des valeurs propres du potentiel de Cornell en termes d'intégrales elliptiques.

Chaudhuri *et al.* [11] ont utilisé la méthode du déterminant de Hill pour obtenir une approximation des valeurs propres du potentiel de Cornell. Ces valeurs d'énergies

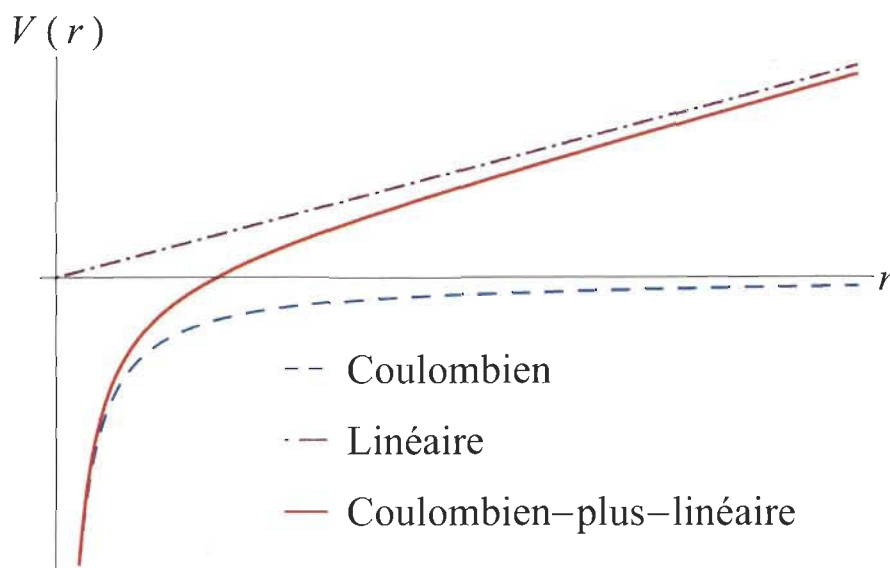


FIGURE 1.1 – Représentation de la forme des potentiels coulombien, linéaire et coulombien-plus-linéaire.

propres prennent la forme des racines du déterminant d'une matrice de dimension infinie reliant les coefficients du développement de la solution.

Maksimenko et Kuchin [12] ont utilisé la méthode de Nikiforov-Uvarov pour trouver les expansions asymptotiques des fonctions d'onde et des énergies propres associées au potentiel de Kilingbeck.

Castro et Martin [13] ont utilisé la méthode des approximants quasifractionnels à deux points, qui consiste à relier la série de puissances avec l'expansion asymptotique, pour obtenir une expression analytique des énergies des premiers niveaux associées au potentiel de Kilingbeck.

Christian *et al.* [14] ont utilisé la méthode du Wronskien pour approximer les valeurs propres des systèmes liés et ont testé les résultats avec des potentiels de la famille de Kilingbeck. Ils ont trouvé les expansions asymptotiques des fonctions et des énergies propres.

Lors de la résolution de l'équation de Schrödinger pour un potentiel radial de la forme d'une somme de puissances de r , il est toujours possible d'exprimer la fonction d'onde comme le produit d'une fonction radiale et d'une harmonique sphérique. Le problème survient lors de la résolution de l'équation radiale par la méthode de Frobenius. Cette méthode transforme la résolution d'une équation différentielle en la résolution d'une équation de récurrence entre les coefficients du développement en série de la solution. Cette équation de récurrence possède toujours plus de deux termes à l'exception des cas où le potentiel est donné par $-\frac{a}{r}$ ou br^2 . Ces potentiels représentent respectivement l'interaction coulombienne et l'oscillateur harmonique. Lorsque l'équation de récurrence ne possède que deux termes, il est possible de la résoudre et d'obtenir une solution en termes de fonctions spéciales. Dans le cas du potentiel coulombien-plus-linéaire, c'est la présence du terme linéaire qui rend la résolution de l'équation de Schrödinger impossible avec les méthodes traditionnelles de physique mathématique via les fonctions spéciales en ajoutant deux termes supplémentaires à l'équation de récurrence. En 1978, Antippa et Phares, ont publié une méthode utilisant les fonctions combinatoires pour résoudre le problème des fonctions d'ondes et des valeurs propres d'énergie pour le potentiel linéaire [1]. En 2005, Plante et Antippa ont utilisé cette méthode pour trouver les fonctions d'ondes du potentiel coulombien-plus-linéaire [15].

La méthodologie utilisée dans ce mémoire sera semblable à celle d'Antippa et Phares pour le cas du potentiel linéaire. Celle-ci consiste à lier les conditions limites des fonctions propres à l'origine et à l'infini afin de déterminer une contrainte sur les énergies propres. L'objectif de ce mémoire est alors de trouver, de façon analytique, la contrainte sur les valeurs propres de l'énergie d'un Hamiltonien associé au potentiel coulombien-plus-linéaire. Cette équation aura la forme d'une fonction polynomiale de degré infini en termes de l'énergie dont les racines (zéros) sont reliées aux valeurs propres d'énergies du système. Ce mémoire est une continuation directe des travaux de Plante et Antippa. Les développements sur les fonctions d'ondes associées

au potentiel coulombien-plus-linéaire obtenus en 2005 serviront pour l'élaboration des conditions limites du problème et ainsi, permettront de développer l'équation des énergies propres.

Ce mémoire se divise en 4 chapitres. Dans le chapitre 2, un rappel des résultats de Plante et Antippa est présenté. De plus, le comportement asymptotique de la solution est étudié et les conditions aux limites sont déterminées. Dans le chapitre 3, l'équation de récurrence liant les coefficients du développement en série est inversée et résolue en termes des fonctions combinatoires que l'on exprime à l'aide des fonctions de structure. Le chapitre 4 consiste à dériver des équations de récurrence pour les fonctions de structure. Finalement, dans le chapitre 5, l'équation aux énergies propres est développée sous la forme d'une fonction polynomiale de degré infini dont les racines sont reliées aux valeurs d'énergie propre.

Chapitre 2

Les fonctions propres

En 2005, Plante et Antippa [15] ont trouvé une expression analytique des fonctions propres associées au potentiel coulombien-plus-linéaire. Cette première section a pour but de résumer les résultats importants obtenus par Plante et Antippa qui seront nécessaires au développement de la contrainte sur les valeurs d'énergies propres. De plus, dans cette section, le comportement asymptotique de la solution sera étudié.

2.1 Équation radiale

Plante et Antippa ont montré que l'équation de Schrödinger radiale pour le potentiel coulombien-plus-linéaire (1.1) donnée par

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V_0 + \kappa r - \frac{\alpha}{r} \right] u_{nl}(r) = E_{nl} u_{nl}(r), \quad (2.1)$$

où μ est la masse réduite du système, l est le nombre quantique orbital, \hbar est la constante de Planck réduite et où $u_{nl}(r)$ est relié à la fonction propre par

$$\psi_{nlm}(\vec{r}) = Y_l^m(\theta, \phi) r^{-1} u_{nl}(r), \quad (2.2)$$

peut se réduire à une forme adimensionnelle donnée par

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{l(l+1)}{x^2} - x + \frac{\rho}{x} + t_{nl} \right] u_{nl}(x) = 0, \quad (2.3)$$

en effectuant les changements de variables suivants

$$x = \left(\frac{2\mu\kappa}{\hbar^2} \right)^{1/3} r, \quad \rho = \alpha \left(\frac{4\mu^2}{\hbar^4\kappa} \right)^{1/3}, \quad \text{et} \quad t_{nl} = \left(\frac{2\mu}{\hbar^2\kappa^2} \right)^{1/3} (E_{nl} - V_0). \quad (2.4)$$

L'équation (2.3) s'écrit alors à l'aide de la variable adimensionnelle x , du paramètre adimensionnel de couplage ρ et du paramètre adimensionnel t_{nl} lié à l'énergie du système.

En utilisant la méthode de Frobenius, Plante et Antippa ont trouvé que la solution qui ne diverge pas à l'origine peut s'écrire comme une série de la forme

$$u_{nl}(x) = \sum_{m=0}^{\infty} b_m x^{m+l+1}. \quad (2.5)$$

L'équation de récurrence reliant les différents coefficients de la série de puissance de la solution prend alors la forme

$$m(m+2l+1)b_m = -\rho b_{m-1} - t_{nl}b_{m-2} + b_{m-3}, \quad m \in \mathbb{N}, \quad (2.6)$$

avec les conditions initiales

$$b_m = \lambda_0 \delta_{m0} \quad \text{pour} \quad m \leq 0. \quad (2.7)$$

Le symbole δ_{ij} représente le delta de Kronecker et est défini comme étant nul si $i \neq j$ et égal à 1 si $i = j$. Il est possible de réécrire l'équation (2.6) sous une forme où b_m est isolé comme

$$b_m = -\rho f(m, l)b_{m-1} - t_{nl}f(m, l)b_{m-2} + f(m, l)b_{m-3}, \quad (2.8)$$

avec

$$f(m, l) = \frac{1}{m(m + 2l + 1)}. \quad (2.9)$$

En définissant

$$f_1(m) = -\rho f(m, l), \quad f_2(m) = -t_{nl}f(m, l), \quad f_3(m) = f(m, l), \quad (2.10)$$

l'équation (2.6) peut également s'écrire

$$b_m = f_1(m)b_{m-1} + f_2(m)b_{m-2} + f_3(m)b_{m-3}. \quad (2.11)$$

Cette équation représente le lien entre les différents coefficients de la solution en série (2.5). La résolution de cette équation de récurrence constitue un défi de taille qui sera traité dans la prochaine section.

2.2 Résolution de l'équation de récurrence

Tout d'abord, il faut noter que l'équation (2.11) est une équation de récurrence linéaire homogène à quatre termes avec des coefficients variables et que ce type d'équation ne se résout pas avec les méthodes traditionnelles de résolution. En effet, pour résoudre ce type d'équation, il est nécessaire d'avoir recours à une méthode introduite par Antippa et Phares [16] utilisant les fonctions combinatoires. Plante et Antippa ont d'ailleurs trouvé la solution de l'équation (2.11) en termes de ces fonctions combinatoires. La solution soumise aux conditions frontières (2.7) du problème peut alors

s'exprimer comme

$$b_m = \lambda_0 C_2(0, m), \quad (2.12)$$

où $C_2(0, m)$ est la fonction combinatoire spéciale de seconde espèce qui sera défini à l'équation (2.13). Les fonctions combinatoires sont étroitement liées aux façons de partitionner un intervalle avec un ensemble de parts donné. En fait, il est nécessaire de trouver l'intégralité des partitions ordonnées d'un intervalle afin de déterminer la fonction combinatoire associée. Une fonction combinatoire est, en fait, une fonctionnelle définie sur l'ensemble des partitions ordonnées d'un intervalle. Les fonctions combinatoires spéciales de seconde espèce sont définies comme

$$C_2(m_1, m_2) = \sum_{r=1}^{r_{\max}(m_1, m_2)} F_{n(r)}^r(m_1, m_2), \quad (2.13)$$

où r permet d'indicer toutes les partitions de l'intervalle $[m_1, m_2]$ de 1 jusqu'au nombre maximal de partitions $r_{\max}(m_1, m_2)$ et où $n(r)$ représente le nombre de parts contenues dans la partition r . La fonctionnelle $F_{n(r)}^r(m_1, m_2)$ est définie par

$$F_{n(r)}^r(m_1, m_2) = \prod_{j=1}^n f_{\delta_j}(s_j). \quad (2.14)$$

où δ_j représente la longueur de la j^{e} part d'une partition et s_j représente la position de cette j^{e} part, où les fonctions $f_{\delta_j}(s_j)$ sont les coefficients de l'équation de récurrence définie à l'équation (2.10). On peut également exprimer les positions s_j à l'aide de la borne inférieure de l'intervalle et des longueurs de parts δ_j comme

$$s_j = m_1 + \sum_{i=1}^j \delta_i. \quad (2.15)$$

Dans le cas des fonctions $f_{\delta_j}(s_j)$ définies à l'équation (2.10), les fonctionnelles $F_{n(r)}^r(0, m)$ se réduisent à

$$F_{n(r)}^r(0, m) = (-\rho)^{p_1} (-t_{nl})^{p_2} \prod_{j=1}^n f(s_j, l), \quad (2.16)$$

avec $f(s_j, l)$ défini par l'équation (2.9) et où p_1 et p_2 sont respectivement les nombres de parts de longueur 1 et 2 associées à la partition r . Les fonctions combinatoires peuvent alors s'écrire comme

$$C_2(0, m) = \sum_{r=1}^{r_{\max}(0, m)} (-\rho)^{p_1} (-t_{nl})^{p_2} \prod_{j=1}^n f(s_j, l). \quad (2.17)$$

Pour faciliter l'indication des partitions, il est commode de remplacer la somme sur r par une somme sur les partitions incluses dans un ensemble $\mathcal{O}(m_1, m_2)$ représentant l'ensemble de toutes les partitions de l'intervalle $[m_1, m_2]$ en parts de longueurs 1, 2 ou 3. Cet ensemble peut par la suite être représenté par l'union des sous-ensembles de partitions possédant précisément p_3 et p_2 parts de longueurs respectives 3 et 2. On note ces ensembles de partitions $\mathcal{O}_{p_3, p_2}(m_1, m_2)$ et chaque partition de cet ensemble possèdera au total $n = (m_2 - m_1 - p_2 - 2p_3)$ parts et $p_1 = (m_2 - m_1 - 2p_2 - 3p_3)$ parts de longueur 1. Plante et Antippa ont également introduit les ensembles $\mathcal{O}_{p_2}(m_1, m_2, n)|_{n=m_2-m_1-p_2-2p_3}$ qui représentent les ensembles des partitions de l'intervalle $[m_1, m_2]$ en $(m_2 - m_1 - p_2 - 2p_3)$ parts et ils ont montré que

$$\mathcal{O}_{p_3, p_2}(m_1, m_2) = \mathcal{O}_{p_2}(m_1, m_2, n)|_{n=m_2-m_1-p_2-2p_3}. \quad (2.18)$$

Ceci permet d'écrire la fonction combinatoire comme

$$C_2(0, m) = \sum_{p_3=0}^{\lfloor m/3 \rfloor} \sum_{p_2=0}^{\lfloor (m-3p_3)/2 \rfloor} (-\rho)^{p_1} (-t_{nl})^{p_2} \left(\sum_{o \in \mathcal{O}_{p_2}(0, m, n)} \prod_{j=1}^n f(s_j, l) \right). \quad (2.19)$$

En définissant une fonction de structure $\beta_l(m_1, m_2; n, p_2)$ comme

$$\beta_l(m_1, m_2; n, p_2) = \sum_{o \in \mathcal{O}_{p_2}(m_1, m_2, n)} \prod_{j=1}^n f(s_j, l), \quad (2.20)$$

et en remplaçant les indices p_3 et p_2 par j et i respectivement, on trouve que les coefficients du développement s'écrivent comme

$$b_m = \lambda_0 (-1)^m \sum_{j=0}^{\lfloor m/3 \rfloor} (-1)^j \sum_{i=0}^{\lfloor (m-3j)/2 \rfloor} (-1)^i \beta_l(0, m; m-2j-i, i) \rho^{m-3j-2i} t_{nl}^i, \quad (2.21)$$

où les valeurs de p_1 et n ont été remplacées respectivement par $m-3j-2i$ et $m-2j-i$. Évidemment les fonctions de structure consistent en elles-même un défi de résolution important qui fût traité en détail par Plante et Antippa.

2.3 Fonctions propres

À l'aide des équations (2.2), (2.5) et (2.21), les fonctions propres peuvent s'écrire comme

$$\begin{aligned} \psi_{nlm}(\vec{r}) &= \lambda_0 Y_l^m(\theta, \phi) x^l \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \sum_{j=0}^{\lfloor m/3 \rfloor} (-1)^j \sum_{i=0}^{\lfloor (m-3j)/2 \rfloor} (-1)^i \\ &\quad \times \beta_l(0, m; m-2j-i, i) \rho^{m-3j-2i} t_{nl}^i x^m \end{aligned} \quad (2.22)$$

où en utilisant les transformations de l'équation (2.4), on obtient

$$\begin{aligned} \psi_{nlm}(\vec{r}) &= \lambda_0 Y_l^m(\theta, \phi) \left(\frac{2\mu\kappa}{\hbar^2} \right)^{(l+1)/3} r^l \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \sum_{j=0}^{\lfloor m/3 \rfloor} (-1)^j \sum_{i=0}^{\lfloor (m-3j)/2 \rfloor} (-1)^i \\ &\quad \times \beta_l(0, m; m-2j-i, i) \kappa^j \alpha^{m-3j-2i} (E_{nl} - V_0)^i \left(\frac{2\mu}{\hbar^2} \right)^{m-2j-i} r^m. \end{aligned} \quad (2.23)$$

On remarque que les fonctions d'onde dépendent de l'énergie E_{nl} . Toutefois ce ne sont pas toutes les valeurs d'énergie qui permettent d'avoir une solution normalisable.

La condition de normalisation de la fonction d'onde $\psi_{nlm}(\vec{r})$ s'écrit

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin \theta \left[Y_l^m(\theta, \phi) r^{-1} u_{nl}(r) \right]^* Y_l^m(\theta, \phi) r^{-1} u_{nl}(r) dr d\theta d\phi \\ &= \int_0^\infty |u(r)|^2 dr \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin \theta Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_l^m(\theta, \phi) d\theta d\phi. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Puisque les harmoniques sphériques sont normalisées à 1, la normalisation de la fonction d'onde est équivalente à

$$1 = \int_0^\infty |u(r)|^2 dr = \left(\frac{\hbar^2}{2\mu\kappa} \right)^{1/3} \int_0^\infty |u(x)|^2 dx. \quad (2.25)$$

Cette dernière condition indique que la normalisation de la fonction d'onde nécessite seulement que la fonction radiale $u_{nl}(x)$ soit normalisable. On notera que si la fonction radiale n'est pas normalisée à 1, la transformation

$$\bar{u}(r) = \frac{u(r)}{(\int_0^\infty |u(r)|^2 dr)^{1/2}}, \quad (2.26)$$

ramènera la normalisation à 1.

2.4 Comportement asymptotique

Dans la limite où x est très grand, les termes en x^{-1} et x^{-2} de l'équation radiale adimensionnelle (2.3) deviendront négligeables par rapport aux autres termes. L'équation (2.3) deviendra alors

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - x + t_{nl} \right] u_{nl}(x) = 0. \quad (2.27)$$

En effectuant le changement de variables $y = x - t_{nl}$, l'équation (2.27) devient

$$\left[\frac{d^2}{dy^2} - y \right] u_{nl}(y) = 0. \quad (2.28)$$

Cette équation est l'équation d'Airy et admet des solutions sous la forme d'une combinaison linéaire de fonctions d'Airy de première et de seconde espèce Ai et Bi donnée par

$$u_{nl}(x) = a\text{Ai}(x - t_{nl}) + b\text{Bi}(x - t_{nl}), \quad (2.29)$$

où a et b sont des constantes arbitraires. En revanche, pour que la fonction d'onde $\psi_{nlm}(\vec{r})$ (2.2) soit normalisable, il est nécessaire que $u_{nl}(x)$ le soit également comme le démontre l'équation (2.25). Puisque $\text{Bi}(x)$ diverge à l'infini, il faut absolument que $b = 0$ afin d'assurer la normalisation de la fonction d'onde. On aura alors que, dans la limite où x est grand, la fonction radiale $u_{nl}(x)$ est proportionnelle à la fonction d'Airy de première espèce $\text{Ai}(x - t_{nl})$, tel que

$$u_{nl}(x) = a\text{Ai}(x - t_{nl}). \quad (2.30)$$

La condition frontière sur $u_{nl}(x)$ peut également s'écrire comme

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{u_{nl}(x)}{\text{Ai}(x - t_{nl})} = \gamma_0, \quad (2.31)$$

où γ_0 sera une constante liée à la normalisation de $u_{nl}(x)$. Pour satisfaire cette condition, il faut remarquer que lorsque x est grand, les puissances élevées de x seront dominantes dans $u_{nl}(x)$. Donc, pour que la fonction $u_{nl}(x)$ soit normalisable, il faudra que les coefficients associés aux puissances x^j du développement de $u_{nl}(x)$, lorsque j tend vers l'infini, deviennent proportionnelles aux coefficients du développement en série de $\text{Ai}(x - t_{nl})$.

2.5 Conditions frontières

L'imposition que la fonction d'onde soit normalisable peut s'exprimer comme le respect des bonnes conditions aux limites. Ces conditions aux limites se séparent en deux groupes, il y a les conditions limites à l'origine et les conditions limites à l'infini. Ces conditions sont d'une importance cruciale, car c'est l'imposition de celles-ci qui discrétisent les valeurs d'énergie.

2.5.1 Condition à l'origine

L'équation (2.6) lorsque $m = 1$, se réduit à

$$2(l+1)b_1 + \rho b_0 + t_{nl}b_{-1} - b_{-2} = 0, \quad (2.32)$$

où d'après les conditions frontières (2.7), $b_{-2} = 0$, $b_{-1} = 0$ et $b_0 = \lambda_0$, l'équation (2.32) devient

$$2(l+1)b_1 + \rho\lambda_0 = 0. \quad (2.33)$$

Cette condition permet d'avoir un lien entre $b_0 = \lambda_0$ et b_1 que l'on pourra combiner plus tard avec la condition à l'infini qui sera discutée dans la sous-section suivante.

2.5.2 Condition à l'infini

À partir de l'équation (2.31), on voit que la solution $u_{nl}(x)$, lorsque $x \rightarrow \infty$, doit être proportionnelle à la fonction d'Airy de première espèce. Cette condition sera respectée si les coefficients, associés aux puissances x^n pour n tendant vers l'infini, convergent vers les coefficients d'Airy. La difficulté est que la fonction d'Airy de l'équation (2.31) est translatée d'une valeur t_{nl} . Les coefficients ne seront alors pas les coefficients d'Airy pour le développement centré à $x = 0$, mais plutôt une combinaison linéaire de ceux-ci. Pour obtenir notre expression, on peut écrire la fonction d'Airy et développer les puissances de $(x - t_{nl})$ à l'aide de la formule du binôme

$$\text{Ai}(x - t_{nl}) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k (x - t_{nl})^k = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \sum_{i=0}^k \binom{k}{i} x^{k-i} (-t_{nl})^i, \quad (2.34)$$

où les $\binom{k}{i}$ sont les coefficients binomiaux. Puisque pour chaque valeur de k il existera un $i \leq k$ tel que $k - i = j$, on peut donc échanger la somme sur k par une somme

sur j en remplaçant k par $j + i$. Il faut noter en revanche que ceci affectera la borne supérieure de la somme sur i , car pour chaque valeur j , il y a une infinité de combinaisons (k, i) telle que $k - i = j$, donc i sera sommé jusqu'à l'infini. On trouve alors que le développement de $\text{Ai}(x - t_{nl})$ peut s'écrire comme

$$\text{Ai}(x - t_{nl}) = \sum_{j=0}^{\infty} \left(\sum_{i=0}^{\infty} a_{j+i} \binom{j+i}{i} (-t_{nl})^i \right) x^j. \quad (2.35)$$

Le coefficient de la j^{e} puissance, a'_j , est alors donné par

$$a'_j(t_{nl}) = \sum_{i=0}^{\infty} a_{j+i} \binom{j+i}{i} (-t_{nl})^i \quad (2.36)$$

et la fonction d'Airy translatée par t_{nl} devient

$$\text{Ai}(x - t_{nl}) = \sum_{j=0}^{\infty} a'_j(t_{nl}) x^j. \quad (2.37)$$

Évidemment, on voit de l'équation (2.36) que dans le cas trivial où $t_{nl} = 0$, on retrouve que $a'_j(0) = a_j$. Pour que l'équation (2.31) soit respectée, il faudra alors que les coefficients associés aux puissances x^n , pour n tendant vers l'infini, convergent vers les coefficients a'_j multipliés par la constante de proportionnalité γ_0 , mais puisque la fonction $u_{nl}(x)$ possède un facteur x^{l+1} supplémentaire (Voir eq. (2.5)), il faudra que b_N tende vers $\gamma_0 a'_{N+l+1}(t_{nl})$. Cette condition s'écrira alors

$$\lim_{N \rightarrow \infty} b_N(l, t_{nl}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \gamma_0 \sum_{i=0}^{\infty} a_{N+l+1+i} \binom{N+l+1+i}{i} (-t_{nl})^i. \quad (2.38)$$

Notons que les coefficients d'Airy a_n obéissent à l'équation récursive [1]

$$a_n = \frac{a_{n-3}}{n(n-1)}, \quad \forall n \geq 3, \quad (2.39)$$

soumise aux conditions initiales

$$a_1 = -\frac{\Gamma(2/3)}{\Gamma(1/3)} 3^{1/3} a_0, \quad a_2 = 0. \quad (2.40)$$

La solution à l'équation (2.39), soumise aux conditions (2.40), est donnée par

$$a_{3p+i} = \frac{(-1)^i \Gamma(2/3)(1 - \delta_{i2})}{3^{2p+2i/3} p! \Gamma(p + 2(i+1)/3)} a_0, \quad i \in \{0, 1, 2\}, \quad p \in \mathbb{N}. \quad (2.41)$$

Cette relation se montre aisément par le principe d'induction mathématique.

Démonstration. D'abord, on remarque que les conditions initiales ($p = 0$) sont respectées pour chaque valeur de i .

Pour $i = 0$:

$$a_0 = \frac{\Gamma(2/3)}{\Gamma(2/3)} a_0 = a_0. \quad (2.42)$$

Pour $i = 1$:

$$a_1 = -\frac{\Gamma(2/3)}{3^{2/3} \Gamma(4/3)} a_0 = -\frac{\Gamma(2/3)}{\Gamma(1/3)} 3^{1/3} a_0. \quad (2.43)$$

Pour $i = 2$:

$$a_2 = 0. \quad (2.44)$$

En supposant que l'équation (2.41) est valide pour $p = k - 1$, on montre qu'elle est également valide pour $p = k$:

$$\begin{aligned} a_{3k+i} &= \frac{a_{3(k-1)+i}}{(3k+i)(3k+i-1)} \\ &= \frac{(-1)^i \Gamma(2/3)(1 - \delta_{i2})}{(3k+i)(3k+i-1) 3^{2(k-1)+2i/3} (k-1)! \Gamma((k-1) + 2(i+1)/3)} a_0 \\ &= \frac{(-1)^i \Gamma(2/3)(1 - \delta_{i2})}{(k+i/3)(k+(i-1)/3) 3^{2k+2i/3} (k-1)! \Gamma((k-1) + 2(i+1)/3)} a_0. \end{aligned}$$

En séparant le calcul pour chaque valeur de i , on trouve que pour $i = 0$,

$$\begin{aligned} a_{3k} &= \frac{\Gamma(2/3)}{k(k-1/3) 3^{2k+2\cdot 0/3} (k-1)! \Gamma(k-1 + 2(0+1)/3)} a_0 \\ &= \frac{\Gamma(2/3)}{3^{2k} k! \Gamma(k + 2/3)} a_0, \end{aligned} \quad (2.45)$$

pour $i = 1$,

$$\begin{aligned} a_{3k+1} &= \frac{-\Gamma(2/3)}{(k + 1/3)k3^{2k+2/3}(k-1)!\Gamma(k-1+2(1+1)/3)} a_0 \\ &= \frac{-\Gamma(2/3)}{3^{2k+2/3}k!\Gamma(k+2(1+1)/3)} a_0, \end{aligned} \quad (2.46)$$

pour $i = 2$,

$$a_{3k+2} = 0. \quad (2.47)$$

□

L'équation (2.41) permet alors de trouver n'importe quel coefficient d'Airy en termes du coefficient a_0 .

On verra dans les prochains chapitres comment l'on peut utiliser les conditions aux limites issues de la normalisation de la fonction d'onde et les fonctions combinatoires afin de trouver une condition sur l'énergie.

Chapitre 3

Équation de récurrence

3.1 Inversion de l'équation de récurrence

Pour inclure la condition frontière à l'infini dans les coefficients, il est nécessaire d'inverser la relation de récurrence (2.6) afin d'exprimer les coefficients du développement en termes des coefficients plus élevés. L'équation de récurrence inversée peut s'écrire comme

$$b_m = g_1(m, l)b_{m+1} + g_2(m, l)b_{m+2} + g_3(m, l)b_{m+3} \quad (3.1)$$

où les fonctions $g_i(m, l)$ sont définies comme

$$g_1(m, l) = t_{nl}, \quad g_2(m, l) = \rho, \quad g_3(m, l) = (m + 3)(m + 2l + 4). \quad (3.2)$$

D'après la méthode introduite par Antippa et Phares [16, 17], la solution de l'équation (3.1) est donnée par

$$b_m = \sum_{j=0}^2 \bar{C}_2^*(N+j, m, j) b_{N+j}, \quad (3.3)$$

où les b_{N+j} , $j \in \{0, 1, 2\}$ sont choisis comme étant les conditions initiales avec N arbitraire, mais supérieur à $m - 2$ et où \bar{C}_2^* est une fonction combinatoire contrainte conjuguée de seconde espèce. La preuve que l'équation (3.3) représente bien la solution de l'équation récursive inversée est présentée à l'annexe A. Il reste alors à déterminer les fonctions combinatoires \bar{C}_2^* .

3.2 Les fonctions combinatoires

Une fonction combinatoire est une fonctionnelle définie sur l'ensemble des partitions ordonnées d'un intervalle. Leur utilité survient lors de la résolution d'équations de récurrences linéaires et homogènes. Dans ce mémoire, on s'intéresse uniquement aux fonctions combinatoires conjuguées qui sont utilisées pour trouver les solutions des équations de récurrences inversées. Il est à noter que le terme *conjuguée* ne fait pas référence à la conjugaison complexe, mais sert plutôt à mettre en évidence les liens entre la solution de l'équation de récurrence inversée et celle de l'équation originale. En revanche, pour alléger les appellations, le terme *conjuguée* ne sera pas écrit pour le reste du mémoire, mais le symbole $*$ sera tout de même appliqué à toutes les fonctions conjuguées. Pour construire les fonctions combinatoires, il est nécessaire d'introduire le concept de partition ordonnée.

3.2.1 Partitions

Il est à noter qu'un traitement plus général des partitions ordonnées est fait dans l'annexe A et que cette sous-section représente le contenu de l'annexe A appliqué à l'équation (3.1). On notera aussi que par partition, l'on entendra partition ordonnée aussi appelée composition.

Supposons un intervalle $[m_1, m_2]$ de longueur $m_2 - m_1 = m$ et l'ensemble

$$\mathcal{A} = \{1, 2, 3\}, \quad (3.4)$$

appelé ensemble des parts. Les éléments de l'ensemble des parts sont les blocs fondateurs des partitions et sont appelés parts. Une partition est la décomposition ordonnée de cet intervalle à l'aide des parts de \mathcal{A} . On peut voir un exemple de deux partitions ordonnées de l'intervalle $[1, 11]$ à la figure 3.1.

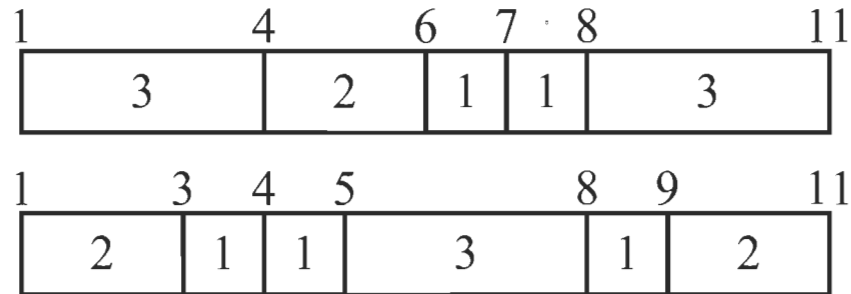


FIGURE 3.1 – Exemples de partitions ordonnées de l'intervalle $[1, 11]$ en parts de longueur 1, 2 et 3.

En définissant le nombre de fois qu'une part de longueur i apparaît dans une partition par p_i et le nombre total de parts d'une partition donnée par n , on peut

construire les deux équations

$$p_1 + 2p_2 + 3p_3 = m, \quad (3.5a)$$

$$p_1 + p_2 + p_3 = n. \quad (3.5b)$$

La première de ces équations représente la longueur totale de l'intervalle et la seconde représente le nombre total de parts. On notera que pour une partition de longueur nulle $m = 0$, l'équation (3.5a) impose que $p_1 = p_2 = p_3 = 0$ et par (3.5b) on trouve que $n = 0$.

Les équations (3.5) imposent alors deux contraintes sur les paramètres m , n , p_1 , p_2 et p_3 , ce qui réduit le nombre de paramètres indépendants à trois. En choisissant m et p_1 comme indépendants et un troisième paramètre ν qui sera introduit sous peu, il sera possible de trouver les expressions de p_2 , p_3 et n comme des fonctions de m , p_1 et ν .

On commence par évaluer le vecteur (p_1, p_2, p_3) associé à une partition de longueur m où $p_1 = 0$. Dans un premier temps, considérons les cas où m est pair ($\text{mod}_2(m) = 0$)¹ et où m est impair ($\text{mod}_2(m) = 1$) séparément.

Pour le cas pair, il est possible de diviser l'intervalle en $m/2$ parts de longueur 2. Cette subdivision mènera au vecteur $(0, m/2, 0)$. Pour insérer une part de longueur 3, il sera obligatoire de remplacer trois parts de longueur 2 par deux parts de longueur 3. En introduisant le paramètre ν , il sera possible de construire l'intégralité des partitions de ce type comme $(0, m/2 - 3\nu, 2\nu)$ pour $\nu \in \{0, \dots, \lfloor m/6 \rfloor\}$.

Pour le cas impair, il sera nécessaire d'avoir au minimum une part de longueur 3 de sorte que $(m - 3)$ soit pair. On peut alors effectuer un traitement similaire au cas pair et obtenir que les partitions seront de la forme $(0, (m - 3)/2 - 3\nu, 2\nu + 1)$ pour

1. Il est à noter que la fonction $\text{mod}_n(m)$ est la fonction modulo définie comme étant le reste de la division entière de m par n

$\nu \in \{0, \dots, \lfloor (m-3)/6 \rfloor\}$. Il est possible de combiner les cas pair et impair à l'aide de la fonction modulo comme

$$\begin{aligned} & \left(0, \frac{m-3 \bmod_2(m)}{2} - 3\nu, 2\nu + \bmod_2(m)\right), \\ & \nu \in \left\{0, \dots, \left\lfloor \frac{m-3 \bmod_2(m)}{6} \right\rfloor\right\}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Pour le cas où $p_1 \neq 0$, il suffit de remplacer la longueur de l'intervalle par $m - p_1$ et d'effectuer un traitement identique pour obtenir la forme générale

$$\begin{aligned} & \left(p_1, \frac{m-p_1-3 \bmod_2(m-p_1)}{2} - 3\nu, 2\nu + \bmod_2(m-p_1)\right), \\ & \nu \in \left\{0, \dots, \left\lfloor \frac{m-p_1-3 \bmod_2(m-p_1)}{6} \right\rfloor\right\}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

À partir de l'équation (3.5b), on trouve que le nombre total de parts est donné par

$$\begin{aligned} n(m, p_1, \nu) &= p_1 + \frac{m - p_1 - 3 \bmod_2(m - p_1)}{2} - 3\nu + 2\nu + \bmod_2(m - p_1) \\ &= \frac{m + p_1 - 2\nu - \bmod_2(m - p_1)}{2}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Évidemment, chaque partition aura ses propres valeurs de m , ν , p_1 , p_2 , p_3 et n , mais deux partitions peuvent posséder les mêmes sans être identiques. En effet, l'inversion de deux parts de longueurs différentes engendrera deux partitions distinctes possédant les mêmes paramètres m , ν et p_1 . La figure 3.2 illustre l'inversion de deux parts de longueurs distinctes créant deux partitions ordonnées différentes, mais possédant les mêmes paramètres m , ν et p_1 . Afin d'avoir une description complète d'une partition, on associe à chacune un n -tuplet de parts $\delta_i \in \mathcal{A}$ que l'on dénote par $\Delta_n^q(m_2, m_1) = (\delta_1, \delta_2, \dots, \delta_n)$, où l'indice q permet d'indicer toutes les partitions possédant n parts. Il est utile de constater que pour des raisons de simplicité ultérieure, la part δ_1 sera la plus proche de la borne supérieure m_2 de l'intervalle, alors que la

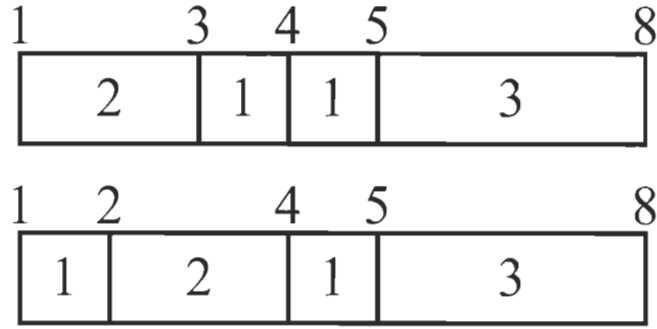


FIGURE 3.2 – Inversion de deux parts de longueurs différentes dans une partition.

part δ_n sera la plus proche de la borne inférieure m_1 . On définit ensuite les points s_i représentant les positions où se termine chaque part comme

$$s_i = m_2 - \sum_{k=1}^i \delta_k \text{ avec } s_0 = m_2 \text{ et } s_n = m_1, \quad (3.9)$$

et le $(n+1)$ -tuplet des points $S_n^q(m_2, m_1) = (s_0, s_1, \dots, s_n)$.

3.2.2 Construction des fonctions combinatoires

Comme il a été énoncé précédemment, les fonctions combinatoires se construisent à partir des partitions d'un certain intervalle. On commence par introduire la fonctionnelle $G_n^q(m_2, m_1)$. Cette fonctionnelle est associée à la q -ième partition ordonnée en n parts de l'intervalle $[m_1, m_2]$ et est définie par

$$G_n^q(m_2, m_1) = \prod_{j=1}^n g_{\delta_j}(s_j, l). \quad (3.10)$$

où les $g_{\delta_j}(s_j, l)$ sont les fonctions de l'équation (3.1) évaluées aux points s_j définis à l'équation (3.9). Puisque qu'une partition aura p_1 , p_2 et p_3 parts de longueurs respectives 1, 2 et 3 et que les fonctions $g_1(s_j, l)$ et $g_2(s_j, l)$ sont indépendantes de s_j , pour chaque fonctionnelle $G_n^q(m_2, m_1)$, on pourra mettre en évidence p_1 fois $t_{nl} =$

$g_1(s_j, l)$ et p_2 fois $\rho = g_2(s_j, l)$. On notera que $g_1(s_j, l)$ dépend du nombre quantique orbital l à travers la valeur d'énergie propre t_{nl} , alors que $g_2(s_j, l)$ est totalement indépendante de l . La fonctionnelle $G_n^q(m_2, m_1)$ se simplifie alors à

$$G_n^q(m_2, m_1) = t_{nl}^{p_1} \rho^{p_2} \prod_{j=1}^n g'_{\delta_j}(s_j, l), \quad (3.11)$$

où $g'_{\delta_j}(s_j, l)$ est définie par

$$g'_{\delta_j}(s_j, l) = \begin{cases} 1 & \text{si } \delta_j \neq 3 \\ g_3(s_j, l) & \text{si } \delta_j = 3 \end{cases}. \quad (3.12)$$

Les fonctions combinatoires spéciales de première espèce sont définies comme

$$C_1^*(m_2, m_1, n) = \sum_{q=1}^{q_{\max}(m_1, m_2, n)} G_n^q(m_2, m_1). \quad (3.13)$$

Ces fonctions permettent ensuite de définir un autre type de fonction combinatoire que l'on appelle fonction combinatoire spéciale de seconde espèce

$$C_2^*(m_2, m_1) = \sum_{n \in \mathcal{N}(m_2 - m_1)} C_1^*(m_2, m_1, n), \quad (3.14)$$

où $\mathcal{N}(m_2 - m_1)$ est l'ensemble de toutes les valeurs possibles de n pour une partition de longueur $m_2 - m_1$. On peut alors exprimer les fonctions combinatoires spéciales de seconde espèce comme

$$C_2^*(m_2, m_1) = \sum_{r=1}^{r_{\max}(m_2, m_1)} G_{n(r)}^r(m_2, m_1), \quad (3.15)$$

où l'indice r permet d'indicer toutes les partitions indépendamment du nombre de parts $n(r)$ qui, en revanche, dépendra de la partition et donc de r . Il est à noter que les fonctions combinatoires $C_2^*(m_2, m_1)$ sont obtenues en sommant l'intégralité des fonctionnelles $G_{n(r)}^r(m_2, m_1)$ associées à chacune des partitions de l'intervalle $[m_1, m_2]$. D'un autre côté, il est également possible de définir des fonctions combinatoires sur

lesquelles on impose certaines contraintes. Tel est le cas pour les fonctions combinatoires contraintes de première espèce

$$\bar{C}_1^*(m_2, m_1, n, d) = \sum_{q \in \mathcal{Q}(m_2 - m_1, n, d)} G_n^q(m_1, m_2), \quad (3.16)$$

où $\mathcal{Q}(m_2 - m_1, n, d)$ est l'ensemble de toutes les partitions de l'intervalle $[m_1, m_2]$ en n parts telles que la première part δ_1 est de longueur supérieure à d . En d'autres mots, les fonctions combinatoires contraintes de première espèce sont très semblables aux fonctions combinatoires spéciales de première espèce à l'exception que la première part soit supérieure à d . Les fonctions combinatoires contraintes conjuguées de seconde espèce s'obtiennent comme la somme sur toutes les valeurs possibles de n des fonctions combinatoires contraintes de première espèce

$$\bar{C}_2^*(m_2, m_1, d) = \sum_{n \in \mathcal{N}(m_2 - m_1, d)} \bar{C}_1^*(m_2, m_1, n, d). \quad (3.17)$$

où $\mathcal{N}(m_2 - m_1, d)$ est l'ensemble de toutes les valeurs possibles de n pour une partition de longueur $m_2 - m_1$ telle que la première part est supérieur à d . Tout comme les fonctions combinatoires spéciales de seconde espèce, il est possible de remplacer les deux sommes sur n et q par une seule somme sur r , mais comme on peut l'imaginer, les fonctions combinatoires contraintes sont plus difficiles à évaluer que leurs consœurs spéciales. Il est donc plus pratique de pouvoir les exprimer comme une combinaison linéaire de fonctions combinatoires spéciales. Le lien entre les fonctions combinatoires spéciales et contraintes de seconde espèce est donné par

$$\bar{C}_2^*(m_2, m_1, d) = \sum_{\substack{a_k \in A \\ a_k > d}} g_{a_k}(m_2 - a_k, l) C_2^*(m_2 - a_k, m_1). \quad (3.18)$$

La démonstration de cette équation est présentée dans l'annexe [A](#) pour l'équation [\(A.41\)](#).

3.3 La somme sur r

Afin d'évaluer la somme sur r introduite à l'équation (3.15), il est commode de classer les différentes partitions dans des ensembles disjoints. Tout d'abord, on introduit l'ensemble de toutes les partitions de l'intervalle $[m_1, m_2]$ en parts de longueur 1, 2 et 3 que l'on dénote $\mathcal{O}(m_2, m_1)$. On dénote ensuite les sous-ensembles $\mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1)$ qui regroupent toutes les partitions de $\mathcal{O}(m_2, m_1)$ ayant précisément p_1 parts de longueur unité. Il est à noter que les ensembles $\mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1)$ sont disjoints, car une partition ne peut pas avoir simultanément p_1 et p'_1 parts de longueur unité si $p_1 \neq p'_1$. Puisqu'au maximum, un intervalle $[m_1, m_2]$ peut avoir m parts de longueur unité et qu'au minimum 0 part, on peut exprimer l'ensemble $\mathcal{O}(m_2, m_1)$ comme

$$\mathcal{O}(m_2, m_1) = \bigcup_{p_1=0}^m \mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1). \quad (3.19)$$

Comme il a été mentionné précédemment, le paramètre ν , apparaissant à l'équation (3.7), permet de fixer les valeurs de p_2 et p_3 . On peut alors introduire des sous-ensembles de $\mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1)$ ayant une valeur particulière de ν . Ces sous-ensembles seront dénotés $\mathcal{O}_{p_1, \nu}(m_2, m_1)$. Pour des raisons similaires au cas précédent, les ensembles $\mathcal{O}_{p_1, \nu}(m_2, m_1)$ sont tous disjoints. En prenant l'union de tous les ensembles $\mathcal{O}_{p_1, \nu}(m_2, m_1)$ pour chaque valeur de ν (voir l'équation (3.7)), on peut exprimer l'ensemble $\mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1)$ comme

$$\mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1) = \bigcup_{\nu=0}^{\left\lfloor \frac{m-p_1-3 \bmod_2(m-p_1)}{6} \right\rfloor} \mathcal{O}_{p_1, \nu}(m_2, m_1). \quad (3.20)$$

En combinant les équations (3.19) et (3.20), on obtient

$$\mathcal{O}(m_2, m_1) = \bigcup_{p_1=0}^m \bigcup_{\nu=0}^{\left\lfloor \frac{m-p_1-3 \bmod_2(m-p_1)}{6} \right\rfloor} \mathcal{O}_{p_1, \nu}(m_2, m_1). \quad (3.21)$$

Puisque la somme sur r consiste à faire une somme sur l'intégralité des partitions de l'intervalle $[m_1, m_2]$, il sera possible de la remplacer par une somme sur tous les éléments de l'ensemble $\mathcal{O}(m_2, m_1)$, mais puisque cet ensemble est le résultat de l'union de plusieurs ensembles disjoints, la somme sur r pourra s'écrire comme

$$\sum_{r=1}^{r_{\max}(m_2, m_1)} = \sum_{p_1=0}^m \sum_{\nu=0}^{\left\lfloor \frac{m-p_1-3 \bmod_2(m-p_1)}{6} \right\rfloor} \sum_{o \in \mathcal{O}_{p_1, \nu}(m_2, m_1)}. \quad (3.22)$$

Puisque n'importe quel triplet des paramètres m , n , p_1 , p_2 , p_3 et ν peut décrire la partition, il y aura une correspondance biunivoque entre les éléments de $\mathcal{O}_{p_1, \nu}(m_2, m_1)$ et de l'ensemble $\mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1, n) \big|_{n=\frac{m+p_1-2\nu-\bmod_2(m-p_1)}{2}}$ où n est lié à m , p_1 et ν par l'équation (3.8)

$$\mathcal{O}_{p_1, \nu}(m_2, m_1) = \mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1, n) \big|_{n=\frac{m+p_1-2\nu-\bmod_2(m-p_1)}{2}}. \quad (3.23)$$

L'équation (3.22) devient alors

$$\sum_{r=1}^{r_{\max}(m_2, m_1)} = \sum_{p_1=0}^m \sum_{\nu=0}^{\left\lfloor \frac{m-p_1-3 \bmod_2(m-p_1)}{6} \right\rfloor} \sum_{o \in \mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1, n)}. \quad (3.24)$$

En insérant les équations (3.11) et (3.24) dans l'équation (3.15), on trouve que

$$C_2^*(m_2, m_1) = \sum_{p_1=0}^m \sum_{\nu=0}^{\left\lfloor \frac{m-p_1-3 \bmod_2(m-p_1)}{6} \right\rfloor} \sum_{o \in \mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1, n)} t_{nl}^{p_1} \rho^{p_2} \prod_{j=1}^n g'_{\delta_j}(s_j, l). \quad (3.25)$$

Puisque les valeurs de p_1 et de p_2 sont les mêmes pour toute partition $o \in \mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1, n)$, il sera possible de les faire commuter avec la somme sur ces partitions pour obtenir

$$C_2^*(m_2, m_1) = \sum_{p_1=0}^m \sum_{\nu=0}^{\left\lfloor \frac{m-p_1-3 \bmod_2(m-p_1)}{6} \right\rfloor} t_{nl}^{p_1} \rho^{p_2} \sum_{o \in \mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1, n)} \prod_{j=1}^n g'_{\delta_j}(s_j, l). \quad (3.26)$$

De façon analogue avec les références [1] et [15], on introduit les fonctions de structure conjuguées $\beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1)$ qui seront définies par

$$\beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1) = \sum_{o \in \mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1, n)} \prod_{j=1}^n g'_{\delta_j}(s_j, l). \quad (3.27)$$

Les fonctions de structure conjuguées $\beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1)$ seront étudiées en détail dans le chapitre 4. À l'aide de ces fonctions de structure, l'équation (3.26) devient

$$C_2^*(m_2, m_1) = \sum_{p_1=0}^m \sum_{\nu=0}^{\left\lfloor \frac{m-p_1-3 \bmod_2(m-p_1)}{6} \right\rfloor} t_{nl}^{p_1} \rho^{p_2} \beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1). \quad (3.28)$$

Il est nécessaire de se rappeler que les valeurs de p_2 et n de la dernière équation sont totalement déterminées par p_1 , ν et la longueur de l'intervalle m . En revanche, pour des raisons esthétiques on conserve la notation p_2 et n .

3.4 Solution de l'équation de récurrence

À l'aide des résultats développés précédemment, il est possible de trouver la solution de l'équation de récurrence (3.1). En insérant l'équation (3.18) dans l'équation (3.3), on obtient

$$b_m = \sum_{j=0}^2 \sum_{\substack{a_k \in \mathcal{A} \\ a_k > j}} g_{a_k}(N+j-a_k, l) C_2^*(N+j-a_k, m) b_{N+j}. \quad (3.29)$$

Puisque l'ensemble des a_k correspond à l'intégralité des entiers entre 1 et 3, il est possible d'effectuer le changement de variable $i = a_k$. La somme sur a_k pourra alors être remplacée par une somme sur i avec les bornes $i_{\min} = j+1$ et $i_{\max} = 3$, de sorte que

$$b_m = \sum_{j=0}^2 \sum_{i=j+1}^3 g_i(N+j-i, l) C_2^*(N+j-i, m) b_{N+j}. \quad (3.30)$$

En insérant ensuite l'équation (3.28) dans l'équation (3.30), on obtient

$$b_m = \sum_{j=0}^2 \sum_{i=j+1}^3 g_i(N+j-i, l) \sum_{p_1=0}^{N+j-i-m} \sum_{\nu=0}^{\left\lfloor \frac{N+j-i-m-p_1-3 \bmod_2(N+j-i-m-p_1)}{6} \right\rfloor} t_{nl}^{p_1} \rho^{p_2} \beta_l^*(N+j-i, m; n, p_1) b_{N+j}. \quad (3.31)$$

En renommant le paramètre p_1 par μ , on obtient

$$b_m = \sum_{j=0}^2 \sum_{i=j+1}^3 g_i(N+j-i, l) \sum_{\mu=0}^{N+j-i-m} \sum_{\nu=0}^{\left\lfloor \frac{N+j-i-m-\mu-3 \bmod_2(N+j-i-m-\mu)}{6} \right\rfloor} t_{nl}^{\mu} \rho^{p_2} \beta_l^*(N+j-i, m; n, \mu) b_{N+j}. \quad (3.32)$$

Cette équation représente la valeur du m^e coefficient, de l'expansion en série (2.5), en termes des coefficients d'ordre supérieur. Dans le chapitre 5, l'équation (3.32) sera utilisée pour trouver la condition qui rendra les $u_{nl}(x)$ normalisables.

Chapitre 4

Fonction de structure conjuguée

La détermination des fonctions de structure $\beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1)$ est une tâche ardue. Dans un premier temps, il est nécessaire de constater que celles-ci sont en réalité des fonctions combinatoires définies sur les ensembles de partitions $\mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1, n)$. Il est alors possible d'utiliser l'homomorphisme H défini à l'équation (A.28) pour lier les ensembles $\mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1, n)$ aux fonctions $\beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1)$. Cet homomorphisme est défini par

$$\begin{aligned}(m + \delta_i, m) &\rightarrow g'_{\delta_i}(m), \\(m, m) &\rightarrow g_0(m) = 1, \\ \wr &\rightarrow \times, \\ \cup &\rightarrow \Sigma.\end{aligned}\tag{4.1}$$

Malgré la grande complexité des fonctions combinatoires, il est préalablement possible de trouver plusieurs conditions qui déterminent à l'avance si la fonction combinatoire sera nulle.

- i. Si $m_2 < m_1$, alors $m = m_2 - m_1 < 0$ et les équations (3.5) n'admettent aucune solution. On en conclut qu'il n'y existe aucune partition allant de m_1 à m_2 et

donc que la fonction de structure est nulle.

- ii. Si $m_2 = m_1$, alors $m = m_2 - m_1 = 0$ et les équations (3.5) n'admettent qu'une solution si $n = p_1 = p_2 = p_3 = 0$. On en conclut qu'il n'y existe aucune partition allant de m_1 à m_2 lorsque $n \neq 0 \neq p_1$. Donc, à l'exception de la fonction de structure $\beta_l^*(m_1, m_1; 0, 0)$, toutes fonctions de structure de la forme $\beta_l^*(m_1, m_1; n, p_1)$ est nulles.
- iii. Si $n < p_1$, alors l'équation (3.5b) n'est pas respectée et il n'y a donc aucune partition possible lorsque $n < p_1$.
- iv. Si $n < \lfloor (m_2 - m_1)/3 \rfloor$, alors l'équation (3.5b) devient

$$p_1 + p_2 + p_3 = n < \left\lfloor \frac{m_2 - m_1}{3} \right\rfloor \leq \frac{m_2 - m_1}{3} \quad (4.2)$$

$$\Rightarrow 3p_1 + 3p_2 + 3p_3 < m_2 - m_1. \quad (4.3)$$

En y insérant l'équation 3.5a, on obtient

$$3p_1 + 3p_2 + 3p_3 < p_1 + 2p_2 + 3p_3 \Rightarrow 2p_1 + p_2 < 0. \quad (4.4)$$

Cette équation ne possède évidemment aucune solution, donc il n'existe aucune partition de l'intervalle $[m_1, m_2]$ lorsque $n < \lfloor (m_2 - m_1)/3 \rfloor$.

- v. Si $n > m_2 - m_1$, alors l'équation (3.5b) devient

$$p_1 + p_2 + p_3 = n > m_2 - m_1. \quad (4.5)$$

En y insérant l'équation 3.5a, on obtient

$$p_1 + p_2 + p_3 > p_1 + 2p_2 + 3p_3 \Rightarrow p_2 + 2p_3 < 0. \quad (4.6)$$

Puisque cette dernière équation ne possède aucune solution, on en conclut qu'il n'existe aucune partition de l'intervalle $[m_1, m_2]$ lorsque $n > m_2 - m_1$.

En résumé, si les paramètres de la fonction de structure $\beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1)$ respectent une des conditions énumérées plus haut, cette fonction de structure sera automatiquement nulle.

4.1 Cas fondamentaux

Comme il été mentionné précédemment, les fonctions de structure $\beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1)$ sont des objets très complexes à évaluer. En revanche, pour quatre cas particuliers, les fonctions $\beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1)$ prennent une forme compacte. Ces cas correspondent à la fonction de structure de longueur nulle et aux fonctions de structures ne possédant qu'une seule partition composée uniquement de parts de longueur respective 1, 2 et 3. Ces fonctions de structure prendront les formes $\beta_l^*(m_1, m_1; n, p_1)$ pour $m_2 - m_1 = 0$, $\beta_l^*(m_1 + n, m_1; n, n)$ pour $p_1 = n$, $\beta_l^*(m_1 + 2n, m_1; n, 0)$ pour $p_2 = n$ et $\beta_l^*(m_1 + 3n, m_1; n, 0)$ pour $p_3 = n$.

4.1.1 Partition de longueur nulle

Si l'on se réfère à la condition **ii**, les fonctions de structure de longueur nulle qui ne sont pas nulles ont obligatoirement $p_1 = n = 0$. Dans le cas où $p_1 = n = 0$, la seule partition sur l'intervalle $[m_1, m_1]$ est la partition ne possédant qu'une seule part de longueur nulle. De l'homomorphisme **4.1** la fonction combinatoire $\beta_l^*(m_1, m_1; 0, 0)$ est définie par

$$\beta_l^*(m_1, m_1; 0, 0) = H(\{(m_1, m_1)\}) = g_0(m_1) = 1. \quad (4.7)$$

4.1.2 Partition composée de part de longueur 1 ou 2

Pour la fonction de structure de la forme $\beta_l^*(m_1 + n, m_1; n, n)$, on aura que

$$\beta_l^*(m_1 + n, m_1; n, n) = \sum_{o \in \mathcal{O}_{p_1=n}(m_1+n, m_1, n)} \prod_{j=1}^n g'_{\delta_j}(s_j, l). \quad (4.8)$$

Puisqu'il n'existe qu'une seule partition ayant seulement des parts de longueurs unités et que la fonction $g'_1(s_j, l) = 1$, la fonction de structure se simplifiera à

$$\beta_l^*(m_1 + n, m_1; n, n) = 1. \quad (4.9)$$

Pour la fonction de structure de la forme $\beta_l^*(m_1 + 2n, m_1; n, 0)$, on aura que

$$\beta_l^*(m_1 + 2n, m_1; n, 0) = \sum_{o \in \mathcal{O}_{p_1=0}(m_1+2n, m_1, n)} \prod_{j=1}^n g'_{\delta_j}(s_j, l). \quad (4.10)$$

Puisqu'encore une fois, il n'existe qu'une seule partition n'ayant que des parts de longueurs 2 et que la fonction $g'_2(s_j, l) = 1$, la fonction de structure se simplifiera à

$$\beta_l^*(m_1 + 2n, m_1; n, 0) = 1. \quad (4.11)$$

4.1.3 Partition composée de part de longueur 3

L'évaluation de la fonction de structure de la forme $\beta_l^*(m_1 + 3n, m_1; n, 0)$ est plus complexe que les deux dernières. En effet, le fait que la fonction $g'_3(s_j, l) \neq 1$ complique légèrement l'évaluation du produit. La fonction de structure s'écrira donc comme

$$\beta_l^*(m_1 + 3n, m_1; n, 0) = \sum_{o \in \mathcal{O}_{p_1=0}(m_1+3n, m_1, n)} \prod_{j=1}^n g'_{\delta_j}(s_j, l), \quad (4.12)$$

où à nouveau, il n'existe qu'une seule partition ayant uniquement des parts de longueurs 3. De plus, puisque tous les segments sont de longueur 3, les positions des parts seront données par $s_j = m_1 + 3(n - j)$. À l'aide de la fonction $g'_3(s_j, l)$ définie à l'équation (3.12), les fonctions de structure de la forme $\beta_l^*(m_1 + 3n, m_1; n, 0)$ seront alors données par

$$\begin{aligned} \beta_l^*(m_1 + 3n, m_1; n, 0) &= \sum_{o \in \mathcal{O}_{p_1=0}(m_1+3n, m_1, n)} \prod_{j=1}^n g'_{\delta_j}(s_j, l) \\ &= \prod_{j=1}^n g_3(m_1 + 3(n - j), l) \\ &= \prod_{j=1}^n (m_1 + 3(n - j) + 3) (m_1 + 3(n - j) + 2l + 4) \\ &= 3^{2n} \prod_{j=1}^n (m_1/3 + n + 1 - j) (m_1/3 + n + 2l/3 + 1/3 + 1 - j) \\ &= 3^{2n} [(m_1 + 3n)/3]^{(n)} [(m_1 + 3n + 2l + 1)/3]^{(n)} \\ &= 3^{2n} [(m_1 + 3)/3]^{[n]} [(m_1 + 2l + 4)/3]^{[n]}, \end{aligned} \quad (4.13)$$

où les symboles de Pochhammer ont été utilisés. Ces symboles seront développés en détail dans l'annexe [B](#).

4.2 Équations de récurrence pour les fonctions de structure

Les fonctions de structure possédant plus d'une partition sont beaucoup plus complexes à évaluer. Pour cette raison, il est commode de développer des équations de récurrence permettant de relier une fonction de structure avec les fonctions de structure définies sur un intervalle de longueur inférieure. On divise les équations de récurrences en deux types : les équations de récurrence linéaires et les équations de récurrence non linéaires.

4.2.1 Équations de récurrence linéaires

Les équations de récurrence linéaires seront créées en réduisant la longueur de l'intervalle à partir de m_1 (ascendante) ou m_2 (descendante). Ces équations sont d'ailleurs les cas les plus simples d'équations de récurrence pour les fonctions $\beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1)$.

Ascendante

Chaque partition de l'ensemble $\mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1, n)$ doit obligatoirement commencer par une part de longueur 1, 2 ou 3. On peut donc exprimer cet ensemble comme

$$\begin{aligned}\mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1, n) &= \mathcal{O}_{p_1-1}(m_2, m_1 + 1, n - 1) \otimes (m_1 + 1, m_1) \\ &\cup \mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1 + 2, n - 1) \otimes (m_1 + 2, m_1) \\ &\cup \mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1 + 3, n - 1) \otimes (m_1 + 3, m_1).\end{aligned}\quad (4.14)$$

En appliquant l'homomorphisme H à l'équation (4.14), on obtient l'équation de récurrence

$$\begin{aligned}\beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1) &= g_1'(m_1)\beta_l^*(m_2, m_1 + 1; n - 1, p_1 - 1) \\ &\quad + g_2'(m_1)\beta_l^*(m_2, m_1 + 2; n - 1, p_1) \\ &\quad + g_3'(m_1)\beta_l^*(m_2, m_1 + 3; n - 1, p_1) \\ &= \beta_l^*(m_2, m_1 + 1; n - 1, p_1 - 1) + \beta_l^*(m_2, m_1 + 2; n - 1, p_1) \\ &\quad + g_3'(m_1)\beta_l^*(m_2, m_1 + 3; n - 1, p_1)\end{aligned}\quad (4.15)$$

Descendante

Chaque partition de l'ensemble $\mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1, n)$ doit obligatoirement commencer par une part de longueur 1, 2 ou 3. On peut donc exprimer cet ensemble comme

$$\begin{aligned}\mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1, n) &= (m_2, m_2 - 1) \otimes \mathcal{O}_{p_1-1}(m_2 - 1, m_1, n - 1) \\ &\cup (m_2, m_2 - 2) \otimes \mathcal{O}_{p_1}(m_2 - 2, m_1, n - 1) \\ &\cup (m_2, m_2 - 3) \otimes \mathcal{O}_{p_1}(m_2 - 3, m_1, n - 1).\end{aligned}\quad (4.16)$$

En appliquant l'homomorphisme H à l'équation (4.16), on obtient l'équation de récurrence

$$\begin{aligned}
\beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1) &= g'_1(m_2 - 1)\beta_l^*(m_2 - 1, m_1; n - 1, p_1 - 1) \\
&\quad + g'_2(m_2 - 2)\beta_l^*(m_2 - 2, m_1; n - 1, p_1) \\
&\quad + g'_3(m_2 - 3)\beta_l^*(m_2 - 3, m_1; n - 1, p_1) \\
&= \beta_l^*(m_2 - 1, m_1; n - 1, p_1 - 1) + \beta_l^*(m_2 - 2, m_1; n - 1, p_1) \\
&\quad + g'_3(m_2 - 3)\beta_l^*(m_2 - 3, m_1; n - 1, p_1). \tag{4.17}
\end{aligned}$$

Les équations (4.15) et (4.17) sont respectivement les équations récursives ascendantes et descendantes des fonctions de structure $\beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1)$.

4.2.2 Équation de récurrence non linéaire

Pour déterminer cette équation de récurrence, on procède en deux étapes. Dans un premier temps, on trouve une équation de récurrence pour les fonctions de structure de la forme $\beta_l^*(m_2, m_1; n, 0)$, soit les fonctions de structure n'ayant aucune part de longueur unité. Par la suite, on trouve les valeurs de $\beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1)$ à l'aide des valeurs de $\beta_l^*(m_2, m_1; n, 0)$.

Équation de récurrence pour les fonctions $\beta_l^*(m_2, m_1; n, 0)$

L'équation de récurrence pour les fonctions de structure de la forme $\beta_l^*(m_2, m_1; n, 0)$ avec p_3 parts de longueur 3 est obtenue en termes des fonctions de structure $\beta_l^*(m_2, m'_1; n', 0)$ avec $p'_3 < p_3$ parts de longueur 3.

On commence par introduire les ensembles $\mathcal{T}(m_2, m_1, n)$ correspondants aux ensembles des partitions de l'intervalle $[m_1, m_2]$ en n parts de longueur 2 et 3. On remarque immédiatement que

$$\mathcal{T}(m_2, m_1, n) = \mathcal{O}_{p_1=0}(m_2, m_1, n), \quad (4.18)$$

où $\mathcal{O}_{p_1=0}(m_2, m_1, n)$ est défini à l'équation (3.23).

On introduit ensuite des sous-ensembles de $\mathcal{T}(m_2, m_1, n)$ que l'on note $\mathcal{T}_i(m_2, m_1, n)$, $i = 0, 1, 2, \dots, p_3$. Les éléments de ces sous-ensembles respectent deux contraintes additionnelles :

- (i) les dernières i parts sont de longueur 3,
- (ii) la $(n - i)^e$ part est de longueur 2¹.

La forme des partitions de ces ensembles est illustrée à la figure 4.1.

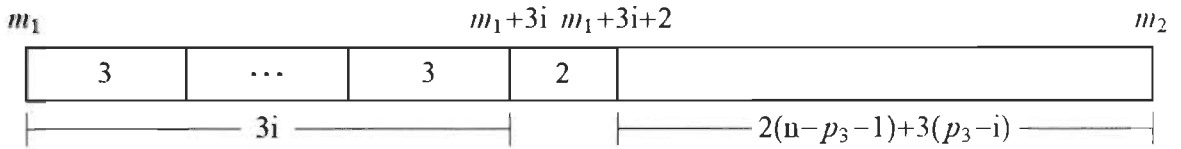


FIGURE 4.1 – Représentation des partitions de l'ensemble \mathcal{T}_i

On note que l'on peut représenter $\mathcal{T}(m_2, m_1, n)$ comme l'union des sous-ensembles $\mathcal{T}_i(m_2, m_1, n)$

$$\mathcal{T}(m_2, m_1, n) = \bigcup_{i=0}^{p_3} \mathcal{T}_i(m_2, m_1, n) \quad (4.19)$$

1. On notera que l'exigence d'avoir une part de longueur 2 rendra l'équation de récurrence invalide pour le cas fondamental composé uniquement de parts de longueur 3.

et que les sous-ensembles $\mathcal{T}_i(m_2, m_1, n)$ sont disjoints, tel que

$$\mathcal{T}_i(m_2, m_1, n) \cap \mathcal{T}_j(m_2, m_1, n) = \emptyset, \quad i \neq j. \quad (4.20)$$

On note également la correspondance entre les sous-ensembles $\mathcal{T}_i(m_2, m_1, n)$ et les ensembles de la forme $\mathcal{O}_{p_1=0}(m_2, m_1 + 3i + 2, n - i - 1)$. En effet, chaque partition de $\mathcal{O}_{p_1=0}(m_2, m_1 + 3i + 2, n - i - 1)$ auquel on ajoute une part de longueur 2 et i parts de longueur 3 correspondra à une seule partition de $\mathcal{T}_i(m_2, m_1, n)$ et chaque partition de $\mathcal{T}_i(m_2, m_1, n)$ auquel on retire les i dernières parts de longueur 3 et la part de longueur 2 correspondra à une seule partition de $\mathcal{O}_{p_1=0}(m_2, m_1 + 3i + 2, n - i - 1)$.

Une somme sur les éléments de $\mathcal{O}_{p_1=0}(m_2, m_1, n)$ peut alors être exprimée comme

$$\sum_{o \in \mathcal{O}_{p_1=0}(m_2, m_1, n)} = \sum_{\tau \in \mathcal{T}(m_2, m_1, n)} = \sum_{i=0}^{p_3} \sum_{\tau \in \mathcal{T}_i(m_2, m_1, n)}. \quad (4.21)$$

Les fonctions de structure de la forme $\beta_l^*(m_2, m_1; n, 0)$ étant définies par

$$\beta_l^*(m_2, m_1; n, 0) = \sum_{o \in \mathcal{O}_{p_1=0}(m_2, m_1, n)} \prod_{j=1}^n g'_{\delta_j}(s_j, l), \quad (4.22)$$

deviennent, en utilisant l'équation (4.21)

$$\beta_l^*(m_2, m_1; n, 0) = \sum_{i=0}^{p_3} \sum_{\tau \in \mathcal{T}_i(m_2, m_1, n)} \prod_{j=1}^n g'_{\delta_j}(s_j, l). \quad (4.23)$$

Pour chacune des partitions de la somme précédente, les i dernières parts sont de longueur 3 et la $(n - i)^{\text{e}}$ part est de longueur 2. Ceci permet de séparer le produit comme

$$\prod_{j=1}^n g'_{\delta_j}(s_j, l) = \left(\prod_{j=1}^{n-i-1} g'_{\delta_j}(s_j, l) \right) g'_2(s_{n-i}, l) \left(\prod_{j=n-i+1}^n g'_{\delta_j}(s_j, l) \right). \quad (4.24)$$

Les positions des i dernières parts, définies à l'équation (3.9), seront dans ce cas données par

$$s_{n-i+k} = m_1 + 3(i - k), \quad k = 1, \dots, i. \quad (4.25)$$

En effectuant le changement d'indice $k = j - n + i$ et en se rappelant que $g'_2(s_j, l) = 1$, l'équation (4.24) devient

$$\prod_{j=1}^n g'_{\delta_j}(s_j, l) = \left(\prod_{j=1}^{n-i-1} g'_{\delta_j}(s_j, l) \right) \left(\prod_{k=1}^i g'_3(m_1 + 3(i - k), l) \right). \quad (4.26)$$

En utilisant la définition de $g'_3(s_j, l)$ et les symboles de Pochhammer, l'équation précédente peut s'écrire comme

$$\prod_{j=1}^n g'_{\delta_j}(s_j, l) = \left(\prod_{j=1}^{n-i-1} g'_{\delta_j}(s_j, l) \right) 3^{2i} [(m_1 + 3)/3]^{[i]} [(m_1 + 2l + 4)/3]^{[i]}. \quad (4.27)$$

On peut maintenant réécrire l'équation (4.23) comme

$$\beta_l^*(m_2, m_1; n, 0) = \sum_{i=0}^{p_3} \sum_{\tau \in \mathcal{T}_i(m_2, m_1, n)} \left(\prod_{j=1}^{n-i-1} g'_{\delta_j}(s_j, l) \right) 3^{2i} [(m_1 + 3)/3]^{[i]} [(m_1 + 2l + 4)/3]^{[i]}. \quad (4.28)$$

Puisque le produit possède $i + 1$ termes en moins, on pourra utiliser la correspondance entre les sous-ensembles $\mathcal{T}_i(m_2, m_1, n)$ et les ensembles de la forme $\mathcal{O}_{p_1=0}(m_2, m_1 + 3i + 2, n - i - 1)$ pour obtenir

$$\begin{aligned} \beta_l^*(m_2, m_1; n, 0) &= \sum_{i=0}^{p_3} \sum_{o \in \mathcal{O}_{p_1=0}(m_2, m_1 + 3i + 2, n - i - 1)} \left(\prod_{j=1}^{n-i-1} g'_{\delta_j}(s_j, l) \right) \\ &\quad \times 3^{2i} [(m_1 + 3)/3]^{[i]} [(m_1 + 2l + 4)/3]^{[i]}. \end{aligned} \quad (4.29)$$

De plus, puisque la fonction de structure de la forme $\beta_l^*(m_2, m_1 + 3i + 2, n - i - 1, 0)$ est définie comme

$$\beta_l^*(m_2, m_1 + 3i + 2, n - i - 1, 0) = \sum_{o \in \mathcal{O}_{p_1=0}(m_2, m_1+3i+2, n-i-1)} \left(\prod_{j=1}^{n-i-1} g'_{\delta_j}(s_j, l) \right), \quad (4.30)$$

l'équation (4.29) devient

$$\begin{aligned} \beta_l^*(m_2, m_1; n, 0) &= \sum_{i=0}^{p_3} \beta_l^*(m_2, m_1 + 3i + 2, n - i - 1, 0) \\ &\quad \times 3^{2i} [(m_1 + 3)/3]^{[i]} [(m_1 + 2l + 4)/3]^{[i]}. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Cette équation est l'équation de récurrence régissant les fonctions de structure ne possédant pas de part de longueur unité. Cette équation est cruciale, car les fonctions de structure de la forme $\beta_l^*(m_2, m_1, n, 0)$ seront utilisées dans le développement de l'équation de récurrence pour les fonctions de structure de la forme $\beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1)$.

Équation de récurrence pour les fonctions $\beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1)$

L'homomorphisme (4.1) permet de lier les fonctions de structure aux ensembles de partitions comme

$$\beta_l(m_2, m_1; n, p_1) = H(\mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1, n)). \quad (4.32)$$

Soit les sous-ensembles de $\mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1, n)$ avec $p_1 \geq 1$ notés $\mathcal{S}_{p_1}^{p'_2, p'_3}(m_2, m_1, n)$ correspondants aux ensembles de partitions de l'intervalle $[m_1, m_2]$ en n parts avec p_1 parts de longueur unité obéissant aux contraintes suivantes :

1. les $(p'_2 + p'_3)$ dernières parts ne sont pas de longueur unité,

2. la part à la position $(n - p'_2 - p'_3)$ est de longueur unité,²
3. la longueur totale des $(p'_2 + p'_3)$ dernières parts est $(2p'_2 + 3p'_3)$.

On notera que p'_2 et p'_3 représentent respectivement le nombre de parts de longueur deux et trois se retrouvant après la dernière part de longueur unité. De plus, on constate que p'_2 sera limité à l'intervalle $0 \leq p'_2 \leq p_2$, alors que p'_3 sera limité à l'intervalle $0 \leq p'_3 \leq p_3$. On peut également alléger la notation des équations qui suivront en introduisant les paramètres n' et m' définis par $n' = p'_2 + p'_3$ et $m' = 2p'_2 + 3p'_3$ et représentant respectivement le nombre total de parts et la longueur totale des parts suivant la dernière part de longueur unité.

La forme des partitions des ensembles $\mathcal{S}_{p_1}^{p'_2, p'_3}(m_2, m_1, n)$ est illustrée à la figure 4.2.

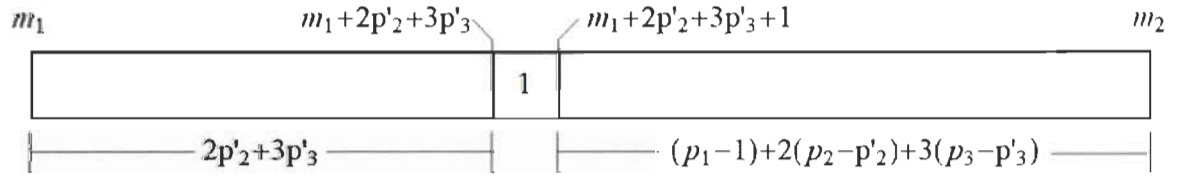


FIGURE 4.2 – Représentation des partitions de l'ensemble $\mathcal{S}_{p_1}^{p'_2, p'_3}(m_2, m_1, n)$

On notera que les ensembles $\mathcal{S}_{p_1}^{p'_2, p'_3}(m_2, m_1, n)$ sont tous disjoints, tel que

$$\mathcal{S}_{p_1}^{p'_2, p'_3}(m_2, m_1, n) \cap \mathcal{S}_{p_1}^{p''_2, p''_3}(m_2, m_1, n) = \emptyset, \quad p'_2 \neq p''_2 \text{ ou } p'_3 \neq p''_3. \quad (4.33)$$

À l'aide de l'opération de fusion, l'ensemble $\mathcal{S}_{p_1}^{p'_2, p'_3}(m_2, m_1, n)$ peut s'exprimer comme

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{p_1}^{p'_2, p'_3}(m_2, m_1, n) &= \mathcal{O}_{p_1-1}(m_2, m_1 + m' + 1, n - n' - 1) \\ &\quad \otimes \{m_1 + m' + 1, m_1 + m'\} \otimes \mathcal{O}_{p_1=0}(m_1 + m', m_1, n'). \end{aligned} \quad (4.34)$$

2. De façon analogue au cas $p_1 = 0$, l'exigence d'avoir une part de longueur unité rendra l'équation de récurrence invalide pour toutes fonctions de structure de la forme $\beta_l^*(m_2, m_1, n, 0)$.

De plus, l'ensemble $\mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1, n)$ avec $p_1 \geq 1$ peut s'écrire comme l'union des ensembles $\mathcal{S}_{p_1}^{p'_2, p'_3}(m_2, m_1, n)$ pour chaque valeur de p'_2 et p'_3 possible

$$\mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1, n) = \bigcup_{p'_2=0}^{p_2} \bigcup_{p'_3=0}^{p_3} \mathcal{S}_{p_1}^{p'_2, p'_3}(m_2, m_1, n). \quad (4.35)$$

En combinant les équations (4.34) et (4.35), on obtient

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1, n) &= \bigcup_{p'_2=0}^{p_2} \bigcup_{p'_3=0}^{p_3} \mathcal{O}_{p_1-1}(m_2, m_1 + m' + 1, n - n' - 1) \\ &\quad \otimes \{m_1 + m' + 1, m_1 + m'\} \otimes \mathcal{O}_{p_1=0}(m_1 + m', m_1, n'). \end{aligned} \quad (4.36)$$

En appliquant l'homomorphisme H sur l'équation (4.36), on trouve que

$$\begin{aligned} H(\mathcal{O}_{p_1}(m_2, m_1, n)) &= \sum_{p'_2=0}^{p_2} \sum_{p'_3=0}^{p_3} H(\mathcal{O}_{p_1-1}(m_2, m_1 + m' + 1, n - n' - 1)) \\ &\quad \times H(\{m_1 + m' + 1, m_1 + m'\}) H(\mathcal{O}_{p_1=0}(m_1 + m', m_1, n')). \end{aligned} \quad (4.37)$$

On sait que $H(\{m_1 + m' + 1, m_1 + m'\}) = 1$, car la fonction combinatoire associée à une partition de longueur unité est simplement $g'_1(s_j, l) = 1$. La dernière équation peut alors s'écrire à l'aide des fonctions de structure comme

$$\begin{aligned} \beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1) &= \sum_{p'_2=0}^{p_2} \sum_{p'_3=0}^{p_3} \beta_l^*(m_2, m_1 + m' + 1, n - n' - 1, p_1 - 1) \\ &\quad \times \beta_l^*(m_1 + m', m_1, n', 0). \end{aligned} \quad (4.38)$$

En remplaçant n' et m' par leurs valeurs en termes de p'_2 et p'_3 , on obtient

$$\begin{aligned} \beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1) &= \sum_{p'_2=0}^{p_2} \sum_{p'_3=0}^{p_3} \beta_l^*(m_2, m_1 + 2p'_2 + 3p'_3 + 1, n - p'_2 - p'_3 - 1, p_1 - 1) \\ &\quad \times \beta_l^*(m_1 + 2p'_2 + 3p'_3, m_1, p'_2 + p'_3, 0). \end{aligned} \quad (4.39)$$

En effectuant les changements d'indices $p'_2 = i$ et $p'_3 = j$, on obtient

$$\begin{aligned} \beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1) &= \sum_{i=0}^{p_2} \sum_{j=0}^{p_3} \beta_l^*(m_2, m_1 + 2i + 3j + 1, n - i - j - 1, p_1 - 1) \\ &\quad \times \beta_l^*(m_1 + 2i + 3j, m_1, i + j, 0). \end{aligned} \quad (4.40)$$

Cette équation est une équation de récurrence non linéaire pour les fonctions de structure de la forme $\beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1)$.

Pour trouver la valeur d'une fonction de structure à l'aide de l'équation de récurrence (4.40), il est donc nécessaire d'évaluer, à l'aide de l'équation (4.31), toutes les fonctions de structures de la forme $\beta_l^*(m, m_1; n, 0)$ pour $m_1 < m < m_2$. Par la suite, on utilise ces résultats afin d'évaluer les fonctions de structures de la forme $\beta_l^*(m_2, m_1; n, p'_1)$ pour $p'_1 \geq 1$ à l'aide de l'équation (4.40) en commençant par $p'_1 = 1$ et graduellement jusqu'à $p'_1 = p_1$.

Chapitre 5

Les énergies propres

5.1 Contrainte sur l'énergie

Dans le chapitre précédent, on a trouvé comment exprimer un coefficient du développement en série de la fonction radiale (2.5) en termes des coefficients d'ordre supérieur. Ceci permet d'exprimer la condition frontière à l'origine (2.33) en termes des coefficients plus élevés qui, en revanche, pourront être reliés à la condition de frontière à l'infini (2.38). Puisque $(l + 1) \neq 0$, la condition frontière à l'origine (2.33) peut être réécrite sous une forme plus compacte comme

$$0 = \sum_{s=0}^1 \left[\frac{\rho}{2(l+1)} \right]^{1-s} b_s. \quad (5.1)$$

Cette équation représente la proportionnalité entre les deux premiers coefficients du développement en série. Il est à noter que l'on a privilégié la notation b_0 plutôt que λ_0 . Ceci a pour but de mettre en évidence que l'indépendance de la condition initiale λ_0 sera transmise à la constante de proportionnalité γ_0 de l'équation (2.38).

En insérant l'équation (3.32) dans l'équation (5.1), on obtient

$$0 = \sum_{s=0}^1 \left[\frac{\rho}{2(l+1)} \right]^{1-s} \sum_{j=0}^2 \sum_{i=j+1}^3 g_i(N+j-i, l) \sum_{\mu=0}^{N+j-i-s} \sum_{\nu=0}^{\left\lfloor \frac{N+j-i-s-\mu-3 \bmod 2(N+j-i-s-\mu)}{6} \right\rfloor} t_{nl}^{\mu} \rho^{p_2} \beta_l^*(N+j-i, s; n, \mu) b_{N+j}, \quad (5.2)$$

où en introduisant la fonction $\nu_{\max}(n) = \left\lfloor \frac{n-3 \bmod 2(n)}{6} \right\rfloor$, on obtient

$$0 = \sum_{s=0}^1 \left[\frac{\rho}{2(l+1)} \right]^{1-s} \sum_{j=0}^2 \sum_{i=j+1}^3 g_i(N+j-i, l) \sum_{\mu=0}^{N+j-i-s} \sum_{\nu=0}^{\nu_{\max}(N+j-i-s-\mu)} t_{nl}^{\mu} \rho^{p_2} \beta_l^*(N+j-i, s; n, \mu) b_{N+j}. \quad (5.3)$$

Certes, l'équation (5.3) permet de lier la condition à l'origine avec les coefficients supérieurs. Toutefois, afin d'utiliser la condition frontière à l'infini (2.38), il est nécessaire de prendre la limite de l'équation (5.3) lorsque $N \rightarrow \infty$,

$$\begin{aligned} 0 &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \sum_{s=0}^1 \left[\frac{\rho}{2(l+1)} \right]^{1-s} \sum_{j=0}^2 \sum_{i=j+1}^3 g_i(N+j-i, l) \sum_{\mu=0}^{N+j-i-s} \sum_{\nu=0}^{\nu_{\max}(N+j-i-s-\mu)} t_{nl}^{\mu} \rho^{p_2} \beta_l^*(N+j-i, s; n, \mu) b_{N+j} \right\} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \sum_{s=0}^1 \left[\frac{\rho}{2(l+1)} \right]^{1-s} \sum_{j=0}^2 \sum_{i=j+1}^3 g_i(N+j-i, l) \sum_{\mu=0}^{N+j-i-s} \sum_{\nu=0}^{\nu_{\max}(N+j-i-s-\mu)} t_{nl}^{\mu} \rho^{p_2} \beta_l^*(N+j-i, s; n, \mu) \right. \\ &\quad \left. \gamma_0 \sum_{k=0}^{\infty} a_{N+j+l+1+k} \binom{N+j+l+1+k}{k} (-t_{nl})^k \right\} \\ &= \gamma_0 \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \sum_{s=0}^1 \left[\frac{\rho}{2(l+1)} \right]^{1-s} \sum_{j=0}^2 \sum_{i=j+1}^3 g_i(N+j-i, l) \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k a_{N+j+l+1+k} \right. \\ &\quad \left. \binom{N+j+l+1+k}{k} \sum_{\mu=0}^{N+j-i-s} \sum_{\nu=0}^{\nu_{\max}(N+j-i-s-\mu)} \rho^{p_2} \beta_l^*(N+j-i, s; n, \mu) t_{nl}^{k+\mu} \right\}. \quad (5.4) \end{aligned}$$

Le résultat est alors une équation polynomiale de degré infini en t_{nl} que l'on dénotera $H_l(\rho, t_{nl})$. On note également que la constante $\gamma_0 \neq 0$ et qu'elle pourra être éliminée pour obtenir simplement $H_l(\rho, t_{nl}) = 0$. De plus, en définissant une suite de fonctions $\{H_l^{(N)}(\rho, t_{nl})\}$ qui converge vers $H_l(\rho, t_{nl})$, on obtient que

$$H_l(\rho, t_{nl}) = \lim_{N \rightarrow \infty} H_l^{(N)}(\rho, t_{nl}), \quad (5.5)$$

où les $H_l^{(N)}(\rho, t_{nl})$ sont définis comme

$$\begin{aligned} H_l^{(N)}(\rho, t_{nl}) = & \sum_{s=0}^1 \left[\frac{\rho}{2(l+1)} \right]^{1-s} \sum_{j=0}^2 \sum_{i=j+1}^3 g_i(N+j-i, l) \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k a_{N+j+l+1+k} \\ & \times \binom{N+j+l+1+k}{k} \sum_{\mu=0}^{N+j-i-s} \sum_{\nu=0}^{\nu_{\max}(N+j-i-s-\mu)} \rho^{p_2} \beta_l^*(N+j-i, s; n, \mu) t_{nl}^{k+\mu}. \end{aligned} \quad (5.6)$$

On peut ensuite introduire un ensemble de suites convergentes $\{K_r^{(N)}(\rho, l)\}$ représentant les coefficients de chaque puissance d'énergie t_{nl}^r associée à $H_l^{(N)}(\rho, t_{nl})$. $H_l^{(N)}(\rho, t_{nl})$ prend alors la forme

$$H_l^{(N)}(\rho, t_{nl}) = \sum_{r=0}^{\infty} K_r^{(N)}(\rho, l) t_{nl}^r. \quad (5.7)$$

En définissant la limite de ces suites par $K_r(\rho, l)$ telle que

$$K_r(\rho, l) = \lim_{N \rightarrow \infty} K_r^{(N)}(\rho, l) \quad (5.8)$$

et en utilisant les équations (5.5) et (5.7), on trouve que $H_l(\rho, t_{nl})$ est donné par

$$0 = H_l(\rho, t_{nl}) = \lim_{N \rightarrow \infty} H_l^{(N)}(\rho, t_{nl}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{r=0}^{\infty} K_r^{(N)}(\rho, l) t_{nl}^r = \sum_{r=0}^{\infty} K_r(\rho, l) t_{nl}^r. \quad (5.9)$$

Pour obtenir les coefficients $K_r^{(N)}(\rho, l)$ il est nécessaire de factoriser les coefficients de chaque puissance de t_{nl} . En comparant les équations (5.6) et (5.7), on trouve que

$$\begin{aligned} \sum_{r=0}^{\infty} K_r^{(N)}(\rho, l) t_{nl}^r &= \sum_{s=0}^1 \left[\frac{\rho}{2(l+1)} \right]^{1-s} \sum_{j=0}^2 \sum_{i=j+1}^3 g_i(N+j-i, l) \\ &\quad \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k a_{N+j+l+1+k} \binom{N+j+l+1+k}{k} \\ &\quad \sum_{\mu=0}^{N+j-i-s} \sum_{\nu=0}^{\nu_{\max}(N+j-i-s-\mu)} \rho^{p_2} \beta_l^*(N+j-i, s; n, \mu) t_{nl}^{k+\mu}. \quad (5.10) \end{aligned}$$

En effectuant le changement de variable $r = k + \mu$, la somme sur k pourra être remplacée par une somme sur r , alors que la somme sur μ verra ses bornes modifiées. En effet, pour chaque valeur de r , il y aura r combinaisons de k et μ tel que $r = k + \mu$ si $r < N + j - i - s$. À l'inverse, il y aura $N + j - i - s$ combinaisons de k et μ tel que $r = k + \mu$ si $r \geq N + j - i - s$. On en conclut que la borne inférieure de μ reste alors inchangée, alors que la borne supérieure sera la valeur minimum entre r et $N + j - i - s$ que l'on note $\min(r, N + j - i - s)$. L'équation (5.10) devient donc

$$\begin{aligned} \sum_{r=0}^{\infty} K_r^{(N)}(\rho, l) t_{nl}^r &= \sum_{s=0}^1 \left[\frac{\rho}{2(l+1)} \right]^{1-s} \sum_{j=0}^2 \sum_{i=j+1}^3 g_i(N+j-i, l) \\ &\quad \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{\mu=0}^{\min(r, N+j-i-s)} \sum_{\nu=0}^{\nu_{\max}(N+j-i-s-\mu)} (-1)^{r-\mu} a_{N+j+l+1+r-\mu} \\ &\quad \binom{N+j+l+1+r-\mu}{r-\mu} \rho^{p_2} \beta_l^*(N+j-i, s; n, \mu) t_{nl}^r. \quad (5.11) \end{aligned}$$

En inversant les sommes sur i et j et en réarrangeant l'équation, on obtient

$$\begin{aligned} \sum_{r=0}^{\infty} K_r^{(N)}(\rho, l) t_{nl}^r &= \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{s=0}^1 \left[\frac{\rho}{2(l+1)} \right]^{1-s} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=0}^{i-1} g_i(N+j-i, l) \\ &\quad \sum_{\mu=0}^{\min(r, N+j-i-s)} \sum_{\nu=0}^{\nu_{\max}(N+j-i-s-\mu)} (-1)^{r-\mu} a_{N+j+l+1+r-\mu} \\ &\quad \binom{N+j+l+1+r-\mu}{r-\mu} \rho^{p_2} \beta_l^*(N+j-i, s; n, \mu) t_{nl}^r. \quad (5.12) \end{aligned}$$

On peut à présent expliciter la somme sur i afin de mettre en évidence le facteur t_{nl} présent dans le terme g_1 . On obtiendra alors

$$\begin{aligned}
\sum_{r=0}^{\infty} K_r^{(N)}(\rho, l) t_{nl}^r &= \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{s=0}^1 \left[\frac{\rho}{2(l+1)} \right]^{1-s} \left\{ \sum_{\mu=0}^{\min(r, N-1-s)} \sum_{\nu=0}^{\nu_{\max}(N-1-s-\mu)} (-1)^{r-\mu} a_{N+l+1+r-\mu} \right. \\
&\quad \binom{N+l+1+r-\mu}{r-\mu} \rho^{p_2} \beta_l^*(N-1, s; n, \mu) t_{nl}^{r+1} \\
&\quad + \sum_{j=0}^1 \sum_{\mu=0}^{\min(r, N+j-2-s)} \sum_{\nu=0}^{\nu_{\max}(N+j-2-s-\mu)} (-1)^{r-\mu} a_{N+j+l+1+r-\mu} \\
&\quad \binom{N+j+l+1+r-\mu}{r-\mu} \rho^{p_2+1} \beta_l^*(N+j-2, s; n, \mu) t_{nl}^r \\
&\quad + \sum_{j=0}^2 (N+j)(N+j+2l+1) \\
&\quad \sum_{\mu=0}^{\min(r, N+j-3-s)} \sum_{\nu=0}^{\nu_{\max}(N+j-3-s-\mu)} (-1)^{r-\mu} a_{N+j+l+1+r-\mu} \\
&\quad \left. \binom{N+j+l+1+r-\mu}{r-\mu} \rho^{p_2} \beta_l^*(N+j-3, s; n, \mu) t_{nl}^r \right\}. \quad (5.13)
\end{aligned}$$

Par indépendance linéaire des puissances de t_{nl} , on obtient alors que les coefficients $K_r^{(N)}(\rho, l)$ sont donnés par

$$\begin{aligned}
K_r^{(N)}(\rho, l) &= \sum_{s=0}^1 \left[\frac{\rho}{2(l+1)} \right]^{1-s} \left\{ \sum_{\mu=0}^{\min(r-1, N-1-s)} \sum_{\nu=0}^{\nu_{\max}(N-1-s-\mu)} (-1)^{r-1-\mu} a_{N+l+r-\mu} \right. \\
&\quad \binom{N+l+r-\mu}{r-1-\mu} \rho^{p_2} \beta_l^*(N-1, s; n, \mu) \\
&\quad + \sum_{j=0}^1 \sum_{\mu=0}^{\min(r, N+j-2-s)} \sum_{\nu=0}^{\nu_{\max}(N+j-2-s-\mu)} (-1)^{r-\mu} a_{N+j+l+1+r-\mu} \\
&\quad \binom{N+j+l+1+r-\mu}{r-\mu} \rho^{p_2+1} \beta_l^*(N+j-2, s; n, \mu) \\
&\quad + \sum_{j=0}^2 (N+j)(N+j+2l+1) \sum_{\mu=0}^{\min(r, N+j-3-s)} \sum_{\nu=0}^{\nu_{\max}(N+j-3-s-\mu)} (-1)^{r-\mu} a_{N+j+l+1+r-\mu} \\
&\quad \left. \binom{N+j+l+1+r-\mu}{r-\mu} \rho^{p_2} \beta_l^*(N+j-3, s; n, \mu) \right\}. \quad (5.14)
\end{aligned}$$

L'équation (5.9) représente la condition imposée à l'énergie afin que les solutions de l'équation différentielle (2.3) soient normalisables. Les énergies possibles seront alors les racines d'un polynôme de degré infini en t_{nl} . Évidemment, il est impossible de trouver une forme fermée de toutes les racines de l'équation (5.9). En revanche, il est possible d'obtenir une bonne approximation des valeurs propres en évaluant les coefficients $K_r^{(N)}(\rho, l)$ pour un N assez élevé et en tronquant la somme de l'équation (5.7) pour obtenir une expression approximative de $H_l(\rho, t_{nl})$. Ensuite, il suffit d'évaluer numériquement les racines de l'approximation de $H_l(\rho, t_{nl})$. Bien entendu, plus la valeur de N sera élevée et plus l'on conserve de termes dans la somme, meilleure sera la précision sur les valeurs d'énergies calculées. À la section 5.3, un algorithme est développé pour calculer les coefficients $K_r^{(N)}(\rho, l)$.

5.2 Cas spécial du potentiel linéaire ($\rho = 0$) sans moment cinétique ($l = 0$)

Il est également intéressant de remarquer qu'il existe un cas particulier où le polynôme $H_l(\rho, t_{nl})$ possède une forme fermée. En effet, lorsque $l = 0$ et $\rho = 0$, les coefficients $K_r(\rho, l)$ se réduisent à

$$K_r(0, 0) = \frac{(-1)^r a_{r-1}}{2}. \quad (5.15)$$

Pour démontrer ce résultat, il est utile de constater que l'équation (2.3), dans le cas où $l = 0$ et $\rho = 0$, devient l'équation (2.27)

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - x + t_{nl} \right] u_{nl}(x) = 0. \quad (2.27)$$

La condition (2.31) n'est donc plus valide uniquement dans la limite des grandes valeurs de x , mais bien pour n'importe quelle valeur de x . Ceci implique également que l'équation (2.38) est valide non seulement pour $N \rightarrow \infty$, mais aussi pour tout N en général. On peut en conclure que les coefficients sont, dans ce cas précis, indépendants de N

$$K_r(0, 0) = K_r^{(N)}(0, 0), \quad N = 2, 3, \dots \quad (5.16)$$

On notera que l'équation précédente est valide à partir de $N = 2$ et non $N = 1$, car la relation entre les fonctions combinatoires contraintes et spéciales (3.18) ne tient pas lorsque l'intervalle est de longueur nulle ($N - 1 = 0$) et que cette relation a été utilisée dans le développement de l'équation (5.14).

En choisissant $N = 2$, l'équation (5.14), lorsque $\rho = 0$ et $l = 0$, devient

$$\begin{aligned} K_r^{(2)}(0, 0) = & \sum_{\mu=0}^{\min(r-1,0)} \sum_{\nu=0}^{\nu_{\max}(-\mu)} (-1)^{r-1-\mu} a_{2+r-\mu} \\ & \left(\frac{2+r-\mu}{r-1-\mu} \right) \rho^{\frac{-\mu-3\text{mod}_2(-\mu)}{2}-3\nu} \beta_0^* \left(1, 1; \frac{\mu-2\nu-\text{mod}_2(-\mu)}{2}, \mu \right) \\ & + \sum_{j=0}^2 (2+j)(3+j) \sum_{\mu=0}^{\min(r,j-2)} \sum_{\nu=0}^{\nu_{\max}(j-2-\mu)} (-1)^{r-\mu} a_{3+j+r-\mu} \\ & \left(\frac{3+j+r-\mu}{r-\mu} \right) \rho^{\frac{j-2-\mu-3\text{mod}_2(j-2-\mu)}{2}-3\nu} \\ & \beta_0^* \left(j-1, 1; \frac{j-2+\mu-2\nu-\text{mod}_2(j-2-\mu)}{2}, \mu \right). \end{aligned} \quad (5.17)$$

On notera que, de l'équation (5.14), le seul terme de la somme sur s restant est celui où $s = 1$ à cause du facteur $\rho = 0$ lorsque $s = 0$. De plus, le facteur ρ^{p_2+1} est toujours nul puisque $p_2 \geq 0$ et donc la deuxième somme de l'équation (5.14) disparaît. Finalement, on remarquera qu'il reste encore des termes possédant le facteur ρ , car il est possible que l'exposant de ρ soit nul. Pour simplifier encore plus l'équation, on

sépare la démarche en deux cas.

i) Pour $r = 0$, le premier terme de l'équation (5.17) disparaîtra, alors que le second terme s'annulera tout le temps à l'exception du cas où $j = 2$, $\mu = 0$ et $\nu = 0$. On obtient donc

$$K_0^{(2)}(0, 0) = (4)(5)a_5 \binom{5}{0} \beta_0^*(1, 1; 0, 0). \quad (5.18)$$

Puisque $a_5 = 0$, on obtient que le premier coefficient $K_0(0, 0)$ est nul.

ii) Pour $r \neq 0$, le premier terme s'annulera sauf si $\mu = 0$ et $\nu = 0$ et le second terme disparaîtra sauf si $j = 2$, $\mu = 0$ et $\nu = 0$

$$\begin{aligned} K_r^{(2)}(0, 0) &= (-1)^{r-1} a_{2+r} \binom{2+r}{r-1} \beta_0^*(1, 1; 0, 0) \\ &\quad + (4)(5)(-1)^r a_{5+r} \binom{5+r}{r} \beta_0^*(1, 1; 0, 0). \end{aligned} \quad (5.19)$$

En se rappelant que les fonctions de structure de la forme $\beta_0^*(1, 1; 0, 0)$ sont égales à 1, en développant les coefficients binomiaux et en utilisant l'équation de récurrence (2.39), on obtient

$$\begin{aligned} K_r^{(2)}(0, 0) &= (-1)^{r-1} a_{2+r} \frac{(r+2)!}{(r-1)!3!} + (4)(5)(-1)^r a_{5+r} \frac{(r+5)!}{r!5!} \\ &= (-1)^{r-1} a_{2+r} \frac{(r+2)(r+1)r}{3!} + (-1)^r a_{5+r} \frac{(r+5)(r+4)(r+3)(r+2)(r+1)}{3!} \\ &= (-1)^{r-1} a_{r-1} \frac{r}{3!} + (-1)^r a_{r-1} \frac{(r+3)}{3!} \\ &= (-1)^r a_{r-1} \frac{3}{3!} = \frac{(-1)^r a_{r-1}}{2}. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Les coefficients $K_r(0,0)$ sont alors bel et bien donnés par l'équation (5.15) avec la condition que $a_{-1} = 0$. En insérant ce résultat dans l'équation (5.9), on obtient

$$H_0(0, t_{nl}) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(-1)^r a_{r-1}}{2} t_{nl}^r = \frac{-t_{nl}}{2} \sum_{r=1}^{\infty} a_{r-1} (-t_{nl})^{r-1} = \frac{-t_{nl} \text{Ai}(-t_{nl})}{2}. \quad (5.21)$$

La contrainte sur l'énergie peut alors s'exprimer à l'aide de la fonction d'Airy de première espèce. En traçant le graphique de la contrainte (5.21), on voit que les valeurs propres d'énergie correspondent aux zéros de la fonction d'Airy.

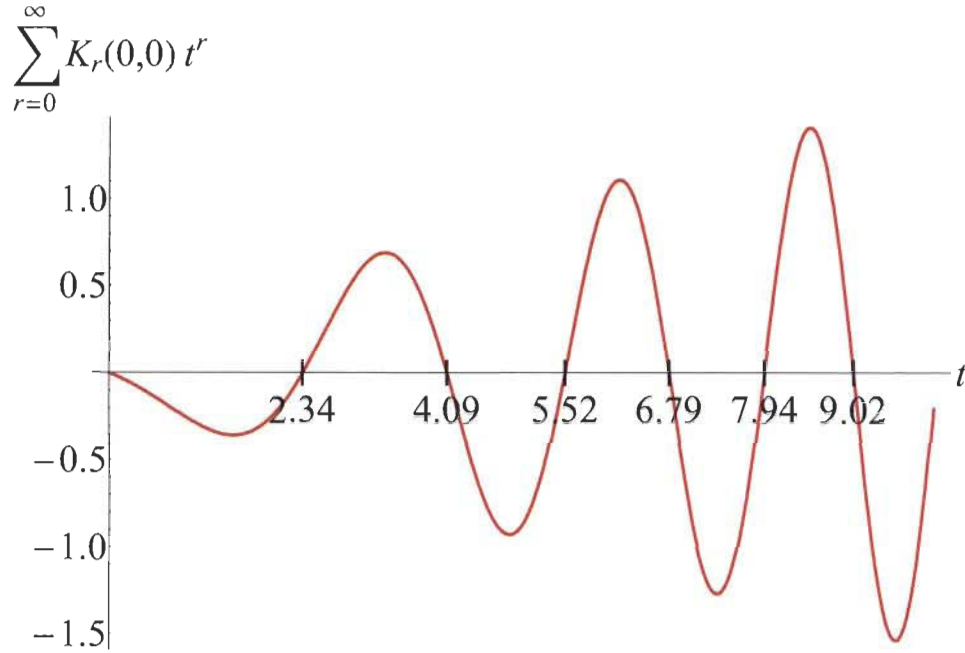


FIGURE 5.1 – Représentation graphique de $H_0(0, t)$.

Évidemment, le choix de N est totalement arbitraire, mais la simplification de l'équation (5.14) est plus corsée plus N est grand, ce qui explique pourquoi $N = 2$ a été utilisé. Toutefois, des calculs numériques montrent facilement ce résultat pour n'importe quelle valeur de N .

5.3 Résultats numériques

Comme il a été mentionné dans la section 5.1, dans la quasi-totalité des cas, la fonction polynomiale $H_l(\rho, t_{nl})$ ne possède pas de forme fermée. On utilise alors les $H_l^{(N)}(\rho, t_{nl})$, que l'on tronque à un certain r , afin d'obtenir une bonne approximation de $H_l(\rho, t_{nl})$. Évidemment, plus N et r sont élevés, plus l'approximation se rapprochera de $H_l(\rho, t_{nl})$.

La première étape dans le calcul de $H_l^{(N)}(\rho, t_{nl})$ est de trouver les coefficients $K_r^{(N)}(\rho, l)$ jusqu'à un r donné. Toutefois, la détermination des $K_r^{(N)}(\rho, l)$ nécessite de connaître les valeurs des fonctions de structure conjuguées $\beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1)$. La première étape est donc d'utiliser les résultats développés au chapitre 4 afin de trouver l'intégralité des valeurs de $\beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1)$ nécessaire au calcul de chaque $K_r^{(N)}(\rho, l)$. Dans le cas présent, l'équation de récurrence linéaire ascendante (4.15) est utilisée.

La méthodologie consiste à calculer de façon récursive l'ensemble des valeurs de $\beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1)$ pour un n donné et un m_1 fixé à 0 ou 1 à l'aide de l'ensemble des valeurs de $\beta_l^*(m_2, m_1; n-1, p_1)$. On commence alors avec l'ensemble des valeurs de $\beta_l^*(m_2, m_1; 0, p_1)$ qui sont toutes nulles, à l'exception du cas où $m_2 = m_1$ et $p_1 = 0$. Dans ce cas précis, on a de l'équation (4.7) que $\beta_l^*(m_1, m_1; 0, 0) = 1$. Puisque qu'au maximum une partition de longueur $m_2 - m_1$ peut avoir $p_1 = m_2 - m_1$ parts de longueur unité, il faudra calculer les fonctions $\beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1)$ pour tout n et p_1 allant de 0 à $N - s$. Le tableau 5.1 montre les valeurs des fonctions de structure conjuguées pour les trois premières valeurs de n .

$n = 0$					$n = 1$					
p_1					p_1					
	0	1	2	...		0	1	2	...	
m_2	m_1	1	0	0	...	m_1	0	0	0	...
	$m_1 + 1$	0	0	0	...	$m_1 + 1$	0	1	0	...
	$m_1 + 2$	0	0	0	...	$m_1 + 2$	1	0	0	...
	$m_1 + 3$	0	0	0	...	$m_1 + 3$	$g_3(m_1)$	0	0	...
	$m_1 + 4$	0	0	0	...	$m_1 + 4$	0	0	0	...
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	

$n = 2$

p_1						
	0	1	2	3	...	
m_2	m_1	0	0	0	0	...
	$m_1 + 1$	0	0	0	0	...
	$m_1 + 2$	0	0	1	0	...
	$m_1 + 3$	0	2	0	0	...
	$m_1 + 4$	1	$g_3(m_1) + g_3(m_1 + 1)$	0	0	...
$m_1 + 5$	$g_3(m_1) + g_3(m_1 + 2)$	0	0	0	...	
$m_1 + 6$	$g_3(m_1)g_3(m_1 + 3)$	0	0	0	...	
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots		

TABLEAU 5.1 – Tableaux des valeurs de $\beta_l^*(m_2, m_1; n, p_1)$ pour $n = 0, 1, 2$.

Une fois que les fonctions de structure conjuguées sont calculées, il est possible de calculer les coefficients $K_r^{(N)}(\rho, l)$ à l'aide de l'équation (5.14). Pour vérifier la validité des $K_r^{(N)}$, il est nécessaire de calculer la valeur de ceux-ci pour plusieurs valeurs de N de plus en plus élevées et d'examiner si ces coefficients convergent vers des valeurs fixes. Si tel n'est pas le cas, il sera nécessaire d'augmenter encore plus la valeur de N afin d'obtenir un résultat fiable.

Dans la section précédente, il a été mentionné que, dans le cas où $\rho = 0$ et $l = 0$, les coefficients $K_r^{(N)}(0, 0)$ sont indépendants de la valeur de N choisie et que ces coefficients sont donnés par l'équation (5.15). Cette propriété peut servir de test lorsque l'on veut vérifier la validité de l'algorithme. Comme on peut s'y attendre, l'algorithme qui fût développé dans le cadre de ce travail, à l'aide du langage symbolique *Mathema-*

tica, reproduit bien les résultats attendus pour les coefficients $K_r^{(N)}(0, 0)$ pour chaque valeur de N testées.

Dans le cas arbitraire où $l = 0$ et $\rho = 0, 05$ ¹, le calcul des coefficients a été effectué pour plusieurs valeurs de N . Les valeurs des sept premiers coefficients $K_r^{(N)}(0.05, 0)$ sont disponibles dans le tableau 5.2. On constate immédiatement que les coefficients semblent converger rapidement vers une valeur relativement stable pour les premiers coefficients. En revanche, à partir du coefficient $K_5^{(N)}(0.05, 0)$, ceux-ci semblent converger beaucoup plus lentement et nécessiterait d'aller vers des valeurs de N beaucoup plus élevées avant d'obtenir une convergence.

$N \backslash r$	0	1	2	3	4	5	6
3000	-0.0044361626	-0.177421175	-0.12509	0.0021	0.029548	0.01323	0.00431
2999	-0.0044361624	-0.177421170	-0.12506	0.0023	0.029596	0.01171	0.01185
1000	-0.0042548855	-0.177429215	-0.12527	0.0022	0.029565	0.00787	-0.00740
999	-0.0042549951	-0.177429447	-0.12529	0.0019	0.029553	0.01240	0.00250
998	-0.0042549935	-0.177429428	-0.12522	0.0023	0.029595	0.01103	0.00456
300	-0.0039777353	-0.177441781	-0.12560	0.0017	0.029559	0.01175	0.00128
299	-0.0039777250	-0.177441702	-0.12546	0.0022	0.029593	0.01060	0.00133
100	-0.0036231852	-0.177454759	-0.12594	0.0018	0.029568	0.00974	-0.00116
99	-0.0036266554	-0.177456749	-0.12599	0.0015	0.029567	0.01131	0.00061
98	-0.0036266030	-0.177456484	-0.12575	0.0021	0.029591	0.01041	0.00025

TABEAU 5.2 – Tableau des valeurs des coefficients $K_r^{(N)}(0.05, 0)$ pour différentes valeurs de N .

La figure 5.2 montre les courbes générées par les coefficients $K_r^{(N)}(0.05, 0)$ en tronquant la somme à différentes puissances de t_{nl}^r . On voit à la figure 5.2 (a) que les cinq premiers coefficients pour différentes valeurs de N semblent générer la même courbe. En revanche, en ajoutant les deux coefficients suivants (figures 5.2 (b) et (c)), on constate une séparation des courbes produites par les $K_r^{(N)}(0.05, 0)$. La figure 5.2 (d) illustre ce qui se produit pour tout polynôme d'ordre supérieur à huit. Du moins

1. Il est à noter que plusieurs triplets (α, κ, μ) peuvent produire $\rho = 0, 05$.

pour tout $N \leq 3000$, les courbes générées divergent grandement les unes des autres à cause de la non-convergence des $K_r^{(N)}(0.05, 0)$ lorsque $r \geq 6$.

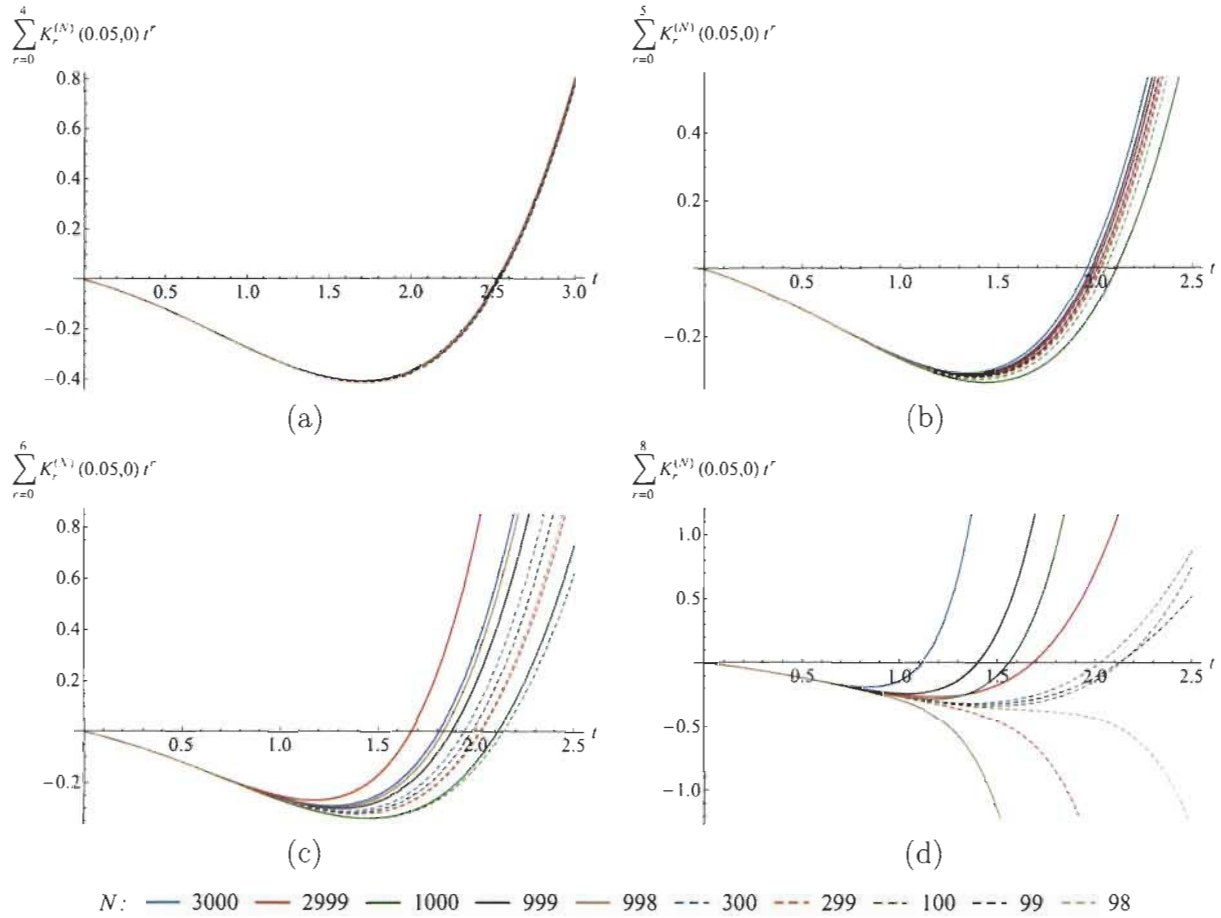


FIGURE 5.2 – Courbes générées par les (a) 5, (b) 6, (c) 7, (d) 9 premières puissances de t .

La solution simple pour corriger ces problèmes de convergences serait d'augmenter la valeur de N de façon drastique. Malheureusement, la majorité du temps de calcul provient de l'algorithme responsable de calculer les fonctions de structure conjuguées. En effet, le temps nécessaire semble être proportionnelle à N^3 ce qui est logique en se rappelant que chacun des trois paramètres prend des valeurs entre 0 et N et qu'il y a donc un total approximatif de N^3 valeurs à calculer. Ceci démontre donc les limites d'obtention de résultats par des méthodes numériques. Le fichier *Mathematica*

contenant l'algorithme qui fut étudié dans cette section est également disponible à l'annexe [C](#).

Conclusion

Dans ce mémoire, une contrainte analytique permettant de discrétiser les valeurs d'énergies associées au potentiel coulombien-plus-linéaire fut développée dans le cadre de l'interaction quark-antiquark. Précédemment, Plante et Antippa ont utilisé les fonctions combinatoires pour trouver analytiquement les fonctions propres associées à ce même potentiel. Cependant, seulement certaines valeurs d'énergies permettent de normaliser ces fonctions propres. La contrainte sur l'énergie est construite de façon à exprimer la condition que les fonctions propres soient normalisables. Pour l'obtenir, le comportement asymptotique de la solution normalisable fut étudié. Le comportement asymptotique de la solution s'est révélé proportionnel à la fonction d'Airy de première espèce translatée par la valeur d'énergie du système. La contrainte s'obtient en liant le comportement asymptotique des fonctions propres à la condition à l'origine à l'aide des fonctions combinatoires. Cette démarche a permis d'exprimer la contrainte sur l'énergie comme une fonction polynomiale en t_{nl} de degré infini tel que les racines de celle-ci sont reliées, par la relation (2.4), aux différentes valeurs d'énergies possibles.

Pour retrouver le spectre d'énergie associé au potentiel linéaire, le coefficient α associé au terme coulombien devra être nul ce qui impliquera que ρ sera également nul. Les expressions des coefficients $K_r^{(N)}(\rho, l)$ se simplifieront alors grandement, car chaque partition tel que $p_2 \neq 0$ amènera une contribution nulle à la fonction combinatoire. Ceci transformera les fonctions de structure conjuguées développées au chapitre 4 en fonctions éponymes d'Antippa et Phares [1]. De plus, en ayant $\rho = 0$, la somme sur s du chapitre 5 se simplifiera en ne laissant que le terme $s = 1$ et les seuls termes de la somme sur ν qui ne tomberont pas à 0 sont ceux tel que ν éliminera le nombre

de parts de longueur 2. Finalement, en effectuant les bons changements d'indice à l'équation (5.14), celle-ci se réduit à l'équation (4.27) de la référence [1]. La contrainte sur les valeurs d'énergies dans la limite du potentiel linéaire se réduit alors à la même contrainte développée par Antippa et Phares en 1978.

Pour le cas du potentiel coulombien, l'équation aux énergies propres est plus difficile à évaluer que dans le cas du potentiel linéaire. En effet, la réduction du potentiel coulombien-plus-linéaire vers le potentiel coulombien impliquera que κ soit nul et donc que la variable x sera également nulle et que les paramètres ρ et t_{nl} divergeront par définition. Pour remédier à la situation, il est possible de redéfinir ces paramètres, mais dans ce cas, l'équation de récurrence associée à ce problème sera grandement différente, car le terme le plus élevé de l'équation n'apparaîtra tout simplement pas. La résolution de l'équation différentielle sera alors totalement différente, car celle-ci sera une équation à trois termes au lieu d'une équation à quatre termes. De plus, le comportement asymptotique est développé sous l'hypothèse que le terme dominant sera celui du potentiel linéaire et donc le comportement asymptotique utilisé dans le développement de la contrainte sur les énergies n'est plus valide dans le cas coulombien. Pour ces raisons, il n'est pas possible d'obtenir l'équation des valeurs propres pour le potentiel coulombien à partir de la contrainte développée dans ce mémoire.

Les méthodes numériques ont également été explorées afin de trouver des approximations aux coefficients $K_r^{(N)}(\rho, l)$. La méthode développée dans ce mémoire est fonctionnelle, mais nécessite des puissances de calcul grandement supérieures à ce qui était attendu. Pour cette raison, des résultats numériques reproduisant les valeurs d'énergies trouvées expérimentalement ont été impossibles à reproduire.

Le potentiel coulombien-plus-linéaire constitue la deuxième application des fonctions combinatoires pour résoudre le problème de la détermination des fonctions propres et des valeurs d'énergies propres associées à un certain potentiel. La première application fût développée par Antippa et Phares en 1978 [1]. En revanche,

l'application de la méthode ne se restreint pas aux potentiels linéaire et coulombien-plus-linéaire. Cette méthode peut être utilisée pour n'importe quel potentiel tel que l'équation de récurrence, associée à la fonction radiale, est linéaire. À titre d'exemple, tout potentiel radial pouvant s'exprimer comme une somme de puissances de r peut ramener le problème à la résolution d'une équation de récurrence linéaire. Une fois l'équation de récurrence linéaire trouvée, la méthode utilisée dans ce mémoire peut facilement être généralisée pour développer une contrainte sur les énergies sous la forme d'une fonction polynomiale de degré infini.

Bibliographie

- [1] A. F. Antippa et A. J. Phares. Journal of Mathematical Physics **19**, 1 308 (1978).
- [2] E. Eichten, K. Gottfried, T. Kinoshita, J. Kogut, K. D. Lane, et T.-M. Yan. Physical Review Letters **34**, 6 369 (1975).
- [3] E. Eichten, K. Gottfried, T. Kinoshita, K. Lane, et T.-M. Yan. Physical Review D **17**, 11 3090 (1978).
- [4] C. Quigg et J. L. Rosner. Physics Reports **56**, 4 167 (1979).
- [5] M. Chaichian et R. Kögerler. Annals of Physics **124**, 1 61 (1980).
- [6] A. Bykov, I. M. Dremin, et A. V. Leonidov. Physics-Uspekhi **27**, 5 321 (1984).
- [7] R. Robinett. European Journal of Physics **31**, 1 1 (2009).
- [8] A. S. Kumar, J. Prasanth, et V. M. Bannur. Physica A : Statistical Mechanics and its Applications **432** 71 (2015).
- [9] L. Thakur et B. K. Patra. Dans *Journal of Physics : Conference Series*, tome 668, p. 012085. IOP Publishing (2016).
- [10] M. Seetharaman, S. Raghavan, et S. Vasan. Journal of Physics A : Mathematical and General **16**, 3 455 (1983).
- [11] R. Chaudhuri, M. Tater, et M. Znojil. Journal of Physics A : Mathematical and General **20**, 6 1401 (1987).
- [12] N. Maksimenko et S. Kuchin. Russian Physics Journal **54**, 1 57 (2011).
- [13] E. Castro et P. Martín. Journal of Physics A : Mathematical and General **33**, 30 5321 (2000).

- [14] R. C. S. Bernardo et C. P. Palisoc. European Journal of Physics **35**, **3** 035024 (2014).
- [15] G. Plante et A. F. Antippa. Journal of mathematical physics **46**, **6** 062108 (2005).
- [16] A. F. Antippa et A. J. Phares. Journal of Mathematical Physics **18**, **1** 173 (1977).
- [17] A. F. Antippa. Journal of Mathematical Physics **18**, **11** 2214 (1977).

Annexe A

Méthodologie

A.1 Introduction

Les équations aux différences finies sont les analogies discrètes des équations différentielles. Ces équations peuvent également s'exprimer sous la forme d'équations de récurrence. Les équations de récurrence possèdent plusieurs utilités dans de nombreuses branches de la science, notamment pour la description de phénomènes discrets. De plus, la résolution d'une équation différentielle en série de puissance mène toujours à la résolution d'une équation de récurrence reliant les coefficients du développement en série de la solution.

Les méthodes de résolution traditionnelles d'équations de récurrence permettent notamment de solutionner trois types d'équations. Le premier type d'équations sont les équations de récurrence linéaires et homogènes à termes multiples avec coefficients constants. On trouve la solution générale de ce type d'équation en trouvant les racines du polynôme caractéristique. Le second type, sont les équations linéaires à deux termes à coefficients variables. Finalement, le troisième type d'équations sont les équations de récurrence linéaires à coefficients variables possédant plus de deux termes. La méthode consiste généralement à observer la forme des premiers termes afin de déterminer la forme de la solution, puis de la prouver par induction mathématique. En revanche, en observant les premiers termes, il est rarement possible

de trouver la bonne forme de solution à prouver par induction, ce qui rend ce type d'équation très complexe à solutionner.

L'objectif de cette annexe est de présenter la méthodologie de résolution d'une équation de récurrence linéaire homogène inversée à coefficients variables de la forme

$$b_m = \sum_{a_k \in \mathcal{A}} g_{a_k}(m) b_{m+a_k}, \quad (\text{A.1})$$

avec les conditions frontières

$$b_{M+j} = \lambda_{M+j}, \quad j \in \mathbb{N}, \quad j < \max(a_k), \quad (\text{A.2})$$

où les fonctions $g_{a_k}(m)$ sont des fonctions arbitraires de m et où l'ensemble \mathcal{A} est un ensemble de nombres entiers appelés ensemble des parts. La résolution de ce type d'équations a été développée par Antippa et Phares en 1977 [16] et par la suite par Antippa [17]. La méthode exprime les solutions de l'équation de récurrence en terme des fonctions combinatoires.

L'annexe se divisera en quatre sections. D'abord, on élaborera le concept de partition¹ qui est un outil fondamental dans le développement des fonctions combinatoires puis on verra comment construire des ensembles de partitions et les équations qui lient ces ensembles. Par la suite, le développement des fonctions combinatoires à l'aide des partitions sera présenté. Pour finir, la solution d'une équation de récurrence linéaire homogène inversée à coefficients variables sera donnée.

A.2 Partitions

Supposons un intervalle $[m_1, m_2]$ et un ensemble

$$\mathcal{A} = \{a_1, a_2, \dots, a_N\}, \quad (\text{A.3})$$

1. Par partition, on entendra partition ordonnée ou composition.

avec la condition

$$0 < a_1 < a_2 < \dots < a_N. \quad (\text{A.4})$$

Cet ensemble est appelé ensemble des parts. On note immédiatement que les N parts de \mathcal{A} sont supérieures à 0 et que celles-ci sont strictement croissantes. Une partition est la décomposition ordonnée d'un intervalle à l'aide des parts de \mathcal{A} . En définissant le nombre de fois qu'une part a_i apparaît dans une partition par p_i ² et le nombre total de parts d'une partition donnée par n , on peut construire les deux équations suivantes

$$\sum_{i=1}^N a_i p_i = m_2 - m_1, \quad (\text{A.5a})$$

$$\sum_{i=1}^N p_i = n. \quad (\text{A.5b})$$

La première de ces équations représente la longueur totale de l'intervalle et la seconde représente le nombre total de parts. Dans le cas où l'intervalle est de longueur nulle, soit que $m_1 = m_2$, les équations (A.5) n'admettent que la solution où l'intégralité des p_i sont nuls et donc que l'intervalle se partitionne en $n = 0$ part. De plus, si $m_2 < m_1$, les équations (A.5) n'admettent aucune solution. Ce résultat est cohérent avec ce qu'on a construit jusqu'ici, puisque par définition, la borne supérieure d'un intervalle ne peut pas être plus petite que la borne inférieure.

Les parts d'une partition sont notés δ_i et sont éléments de l'ensemble des parts \mathcal{A} . La q^e partition d'un intervalle de longueur m en n parts peut alors être représentée par le vecteur

$$\Delta_n^q(m) = (\delta_1, \delta_2, \dots, \delta_n). \quad (\text{A.6})$$

Il est à noter que l'ordre des parts dans le vecteur $\Delta_n^q(m)$ est important, car une permutation de deux parts δ_j et δ_k tel que $\delta_j \neq \delta_k$ créera une nouvelle partition. À partir des éléments de $\Delta_n^q(m)$, on peut construire les positions s_i des points où

2. On notera qu'il est impossible d'avoir un nombre négatif de part et donc les p_i sont tous positifs.

commencent chaque part

$$s_0 = m_2, \quad s_i = m_2 - \sum_{j=1}^i \delta_j, \quad s_n = m_1. \quad (\text{A.7})$$

On peut définir à partir de ceci un vecteur contenant les points où se terminent ces parts

$$S_n^q(m_2, m_1) = (s_0, s_1, \dots, s_n). \quad (\text{A.8})$$

Afin d'éclaircir le concept de partition, les partitions de l'intervalle $[8, 15]$ avec les parts de l'ensemble $\mathcal{A} = \{2, 3, 5\}$ sont illustrées sur la figure [A.1](#).

<i>m</i>	<i>n</i>	<i>q</i>	
7	2	1	<div> <div>8</div> <div>13</div> <div>15</div> <div> <div>5</div> <div>2</div> </div> </div>
7	2	2	<div> <div>8</div> <div>10</div> <div>15</div> <div> <div>2</div> <div>5</div> </div> </div>
7	3	1	<div> <div>8</div> <div>11</div> <div>13</div> <div>15</div> <div> <div>3</div> <div>2</div> <div>2</div> </div> </div>
7	3	2	<div> <div>8</div> <div>10</div> <div>13</div> <div>15</div> <div> <div>2</div> <div>3</div> <div>2</div> </div> </div>
7	3	3	<div> <div>8</div> <div>10</div> <div>12</div> <div>15</div> <div> <div>2</div> <div>2</div> <div>3</div> </div> </div>

FIGURE A.1 – Partitions de l'intervalle $[8, 15]$ en parts incluses dans l'ensemble $\{2, 3, 5\}$.

Les vecteurs $\Delta_n^q(m)$ et $S_n^q(m_2, m_1)$ associés à ces partitions sont donnés dans le tableau [A.1](#). Il est à noter que les partitions ordonnées sont introduites dans le but de résoudre une équation de récurrence *inversée*. Pour cette raison, les vecteurs du tableau [A.1](#) débutent à la borne supérieure de l'intervalle et terminent à la borne inférieure. Cette inversion est également illustrée à la figure [A.2](#) où les vecteurs associés à la partition $n = 3$, $q = 1$ de l'intervalle $[8, 15]$ sont représentés en utilisant la notation des équations [\(A.6\)](#), [\(A.7\)](#) et [\(A.8\)](#).

$\Delta_n^q(m)$	$S_n^q(m_2, m_1)$
$\Delta_2^1(7) = (2, 5)$	$S_2^1(15, 8) = (15, 13, 8)$
$\Delta_2^2(7) = (5, 2)$	$S_2^2(15, 8) = (15, 10, 8)$
$\Delta_3^1(7) = (2, 2, 3)$	$S_3^1(15, 8) = (15, 13, 11, 8)$
$\Delta_3^2(7) = (2, 3, 2)$	$S_3^2(15, 8) = (15, 13, 10, 8)$
$\Delta_3^3(7) = (3, 2, 2)$	$S_3^3(15, 8) = (15, 12, 10, 8)$

TABLEAU A.1 – Vecteurs $\Delta_n^q(m)$ et $S_n^q(m_2, m_1)$ associés aux partitions de l'intervalle $[8, 15]$ en parts appartenant à $\{2, 3, 5\}$.

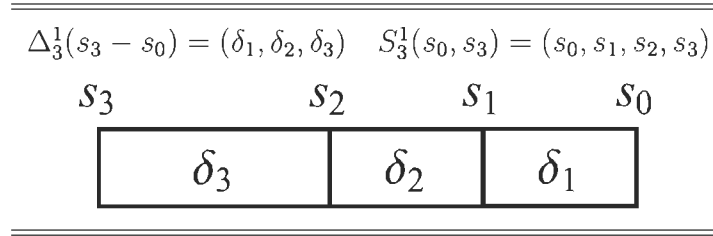


FIGURE A.2 – Représentation des vecteurs $\Delta_3^1(s_3 - s_0)$ et $S_3^1(s_3, s_0)$.

A.3 Opérations et ensembles de partitions

Soit les partitions d'un intervalle $[m_1, m_2]$ en n part que l'on dénote $o_n^q(m_2, m_1)$, où q indice les différentes partitions. Il est possible de définir une opération non commutative de fusion que l'on dénotera \otimes . On peut voir à l'équation (A.9) qu'une partition d'un intervalle $[m_1, m_2]$ peut être décomposée en deux partitions sur les intervalles $[m_1, m]$ et $[m, m_2]$ avec $m_1 \leq m \leq m_2$

$$o_{n_1+n_2}^q(m_2, m_1) = o_{n_1}^{q_1}(m_2, m) \otimes o_{n_2}^{q_2}(m, m_1), \quad m_1 \leq m \leq m_2. \quad (\text{A.9})$$

Cette dernière opération peut être représentée graphiquement à la figure A.3.

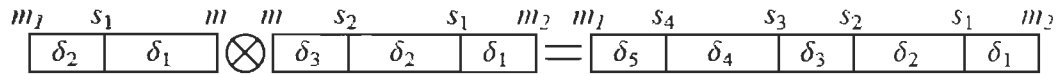


FIGURE A.3 – Représentation graphique de l'équation (A.9).

Cette opération sera distributive sur l'opération d'union, au sens que la fusion d'une partition $o_n^{q'}$ d'un intervalle $[m, m_2]$ avec l'union de plusieurs partitions sur $[m_1, m]$ est égale à l'union de ces partitions fusionnées à $o_n^{q'}$

$$o_n^{q'}(m_2, m) \otimes \bigcup_q o_n^q(m, m_1) = \bigcup_q o_n^{q'}(m_2, m) \otimes o_n^q(m, m_1). \quad (\text{A.10})$$

À l'aide de l'opérateur de fusion, on peut écrire une partition comme un produit de ses segments tel que

$$o_n^q(m_2, m_1) = (m_2, s_1) \otimes (s_1, s_2) \otimes \cdots \otimes (s_{n-1}, m_1), \quad (\text{A.11})$$

où les s_i sont définis à l'équation (A.7). À titre d'exemple, la figure A.4 montre la décomposition de la partition $o_3^1(15, 8)$ comme la fusion de ses segments.

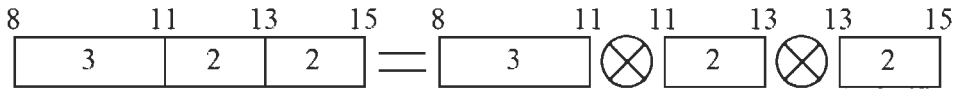


FIGURE A.4 – Décomposition de la partition $o_3^1(15, 8)$.

Définissons par $\mathcal{O}(m_2, m_1)$, l'ensemble de toutes les partitions de l'intervalle $[m_1, m_2]$

$$\mathcal{O}(m_2, m_1) = \{o_n^q(m_2, m_1); n \in \mathcal{N}(m_2 - m_1), q = 1, \dots, q_{\max}(n)\}, \quad (\text{A.12})$$

où $\mathcal{N}(m_2 - m_1)$ est l'ensemble des valeurs de n possibles pour un intervalle de longueur $m_2 - m_1$. On note également que pour un intervalle de longueur nul, on a

$$\mathcal{O}(m_1, m_1) = \{o_0^1(m_1, m_1)\}, \quad (\text{A.13})$$

car la seule partition allant d'un point vers lui-même est la partition ne possédant aucune part. De plus, on note que puisqu'il n'y a aucune solution possible des équations (A.5) lorsque $m_2 < m_1$ et que par le fait même, il n'y a aucune partition possible,

$$\mathcal{O}(m_2, m_1) = \emptyset, \quad \text{si} \quad m_2 < m_1. \quad (\text{A.14})$$

Dans le cas de l'intervalle $[8, 15]$, cet ensemble serait l'ensemble des cinq partitions illustrées à la figure A.1, soit

$$\mathcal{O}(15, 8) = \{o_2^1(15, 8), o_2^2(15, 8), o_3^1(15, 8), o_3^2(15, 8), o_3^3(15, 8)\}. \quad (\text{A.15})$$

L'ensemble de toutes les partitions ayant précisément n parts est noté $\mathcal{O}(m_2, m_1, n)$. En utilisant l'équation (A.12), on peut écrire que

$$\mathcal{O}(m_2, m_1) = \bigcup_{n \in \mathcal{N}(m_2 - m_1)} \mathcal{O}(m_2, m_1, n). \quad (\text{A.16})$$

À titre d'exemple, les ensembles $\mathcal{O}(m_2, m_1, n)$ associés à l'intervalle $[8, 15]$ avec les parts $a_k \in \{2, 3, 5\}$ sont donnés par

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(15, 8, 2) &= \{o_2^1(15, 8), o_2^2(15, 8)\}, \\ \mathcal{O}(15, 8, 3) &= \{o_3^1(15, 8), o_3^2(15, 8), o_3^3(15, 8)\}. \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

On désigne par $\mathcal{O}_{a_k}(m_2, m_1)$, l'ensemble de toutes les partitions de $\mathcal{O}(m_2, m_1)$ ayant comme première³ part a_k et par $\mathcal{O}^{a_k}(m_2, m_1)$ l'ensemble de toutes les partitions de $\mathcal{O}(m_2, m_1)$ ayant comme dernière part a_k . Afin de bien les visualiser, les ensembles associés à l'intervalle $[8, 15]$ sont donnés par

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_2(15, 8) &= \{o_2^1(15, 8), o_3^1(15, 8), o_3^2(15, 8)\}, & \mathcal{O}^2(15, 8) &= \{o_2^2(15, 8), o_3^2(15, 8), o_3^3(15, 8)\}, \\ \mathcal{O}_3(15, 8) &= \{o_3^3(15, 8)\}, & \mathcal{O}^3(15, 8) &= \{o_3^1(15, 8)\}, \\ \mathcal{O}_5(15, 8) &= \{o_2^2(15, 8)\}, & \mathcal{O}^5(15, 8) &= \{o_2^1(15, 8)\}. \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Puisque les a_k sont tous différents, on aura pour $k \neq j$, que

$$\mathcal{O}_{a_k}(m_2, m_1) \cap \mathcal{O}_{a_j}(m_2, m_1) = \emptyset = \mathcal{O}^{a_k}(m_2, m_1) \cap \mathcal{O}^{a_j}(m_2, m_1). \quad (\text{A.19})$$

3. On entend ici par première part, la part qui est la plus près de m_2 et par dernière part la part qui est la plus près de m_1 .

Puisque que toute partition doit obligatoirement commencer (ou terminer) par une part de longueur $a_k \in \mathcal{A}$, on aura que

$$\mathcal{O}(m_2, m_1) = \bigcup_{a_k \in \mathcal{A}} \mathcal{O}_{a_k}(m_2, m_1) \text{ et que } \mathcal{O}(m_2, m_1) = \bigcup_{a_k \in \mathcal{A}} \mathcal{O}^{a_k}(m_2, m_1). \quad (\text{A.20})$$

Les équations (A.19) et (A.20) se confirment aisément avec les ensembles (A.18). Puisque tous les éléments de $\mathcal{O}_{a_k}(m_2, m_1)$ possèdent le segment $(m_2, m_2 - a_k)$, il est possible de décomposer l'ensemble $\mathcal{O}_{a_k}(m_2, m_1)$ comme

$$\mathcal{O}_{a_k}(m_2, m_1) = (m_2, m_2 - a_k) \otimes \mathcal{O}(m_2 - a_k, m_1) \quad (\text{A.21})$$

et de façon similaire on obtient

$$\mathcal{O}^{a_k}(m_2, m_1) = \mathcal{O}(m_2, m_1 + a_k) \otimes (m_1 + a_k, m_1). \quad (\text{A.22})$$

En combinant les équations (A.20) et (A.21), on obtient

$$\mathcal{O}(m_2, m_1) = \bigcup_{a_k \in \mathcal{A}} (m_2, m_2 - a_k) \otimes \mathcal{O}(m_2 - a_k, m_1), \quad (\text{A.23})$$

puis en combinant les équations (A.20) et (A.22), on obtient

$$\mathcal{O}(m_2, m_1) = \bigcup_{a_k \in \mathcal{A}} \mathcal{O}(m_2, m_1 + a_k) \otimes (m_1 + a_k, m_1). \quad (\text{A.24})$$

Il est aussi possible de définir un dernier ensemble noté $\mathcal{O}(m_2, m_1, d)$ qui correspond à l'ensemble de toutes les partitions de $\mathcal{O}(m_2, m_1)$, tel que la première part est de longueur supérieure à d . L'ensemble $\mathcal{O}(m_2, m_1, d)$ est donc donné par

$$\mathcal{O}(m_2, m_1, d) = \bigcup_{\substack{a_k \in \mathcal{A} \\ a_k > d}} \mathcal{O}_{a_k}(m_2, m_1), \quad (\text{A.25})$$

où en combinant cette équation avec l'équation (A.21), on obtient

$$\mathcal{O}(m_2, m_1, d) = \bigcup_{\substack{a_k \in \mathcal{A} \\ a_k > d}} (m_2, m_2 - a_k) \otimes \mathcal{O}(m_2 - a_k, m_1). \quad (\text{A.26})$$

Dans le cas des partitions de l'intervalle $[8, 15]$ les ensembles $\mathcal{O}(15, 8, d)$ sont donnés par

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(15, 8, 0) &= \{o_2^1(15, 8), o_2^2(15, 8), o_3^1(15, 8), o_3^2(15, 8), o_3^3(15, 8)\}, \\ \mathcal{O}(15, 8, 1) &= \{o_2^1(15, 8), o_2^2(15, 8), o_3^1(15, 8), o_3^2(15, 8), o_3^3(15, 8)\}, \\ \mathcal{O}(15, 8, 2) &= \{o_2^2(15, 8), o_3^3(15, 8)\}, \\ \mathcal{O}(15, 8, 3) &= \{o_2^2(15, 8)\}, \\ \mathcal{O}(15, 8, 4) &= \{o_2^2(15, 8)\}, \\ \mathcal{O}(15, 8, 5) &= \emptyset. \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

A.4 Transition vers les fonctions combinatoires

Il est possible d'introduire un homomorphisme H reliant les partitions à des fonctions afin de transformer les équations de la dernière section en équations de récurrence. H enverra un segment $(p + h, p)$ vers une fonction notée $g_h(p)$. Le segment de longueur nulle (p, p) deviendra simplement l'unité $g_0(p) = 1$. Finalement, les opérations de fusion et d'union d'ensembles disjoints deviendront alors respectivement la multiplication et la sommation habituelles. En résumé, on aura

$$\begin{aligned} (p + h, p) &\rightarrow g_h(p), \\ (p, p) &\rightarrow g_0(p) = 1, \\ \otimes &\rightarrow \times, \\ \cup &\rightarrow \sum. \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

On peut à présent évaluer une partition $o_n^q(m_1, m_2)$ à l'aide des fonctions g_{δ_i} . L'équation (A.11) deviendra alors

$$o_n^q(m_2, m_1) \rightarrow g_{\delta_1}(s_1)g_{\delta_2}(s_2) \dots g_{\delta_n}(s_n) = \prod_{i=1}^n g_{\delta_i}(s_i). \quad (\text{A.29})$$

On peut alors associer à chaque partition $o_n^q(m_1, m_2)$, une fonctionnelles $G_n^q(m_2, m_1)$ définie par

$$G_n^q(m_2, m_1) = \prod_{i=1}^n g_{\delta_i}(s_i). \quad (\text{A.30})$$

Dans le cas des partitions de l'intervalle $[8, 15]$, les fonctionnelles $G_n^q(15, 8)$ associées seront données par

$$\begin{aligned} G_2^1(15, 8) &= g_2(13)g_5(8), & G_2^2(15, 8) &= g_5(10)g_2(8), \\ G_3^1(15, 8) &= g_2(13)g_2(11)g_3(8), & G_3^2(15, 8) &= g_2(13)g_3(10)g_2(8), \\ G_3^3(15, 8) &= g_3(12)g_2(10)g_2(8). \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

Les ensembles $\mathcal{O}(m_2, m_1, n)$, étant l'union de toutes les partitions ayant n parts, deviendront la sommation sur q de toutes les fonctionnelles $G_n^q(m_2, m_1)$,

$$\mathcal{O}(m_2, m_1, n) \rightarrow \sum_{q=1}^{q_{\max}(m_2, m_1, n)} G_n^q(m_2, m_1). \quad (\text{A.32})$$

La somme sur tous les fonctionnelles ayant précisément n parts est appelée fonction combinatoire spéciale conjuguée de première espèce qui est définie par

$$C_1^*(m_2, m_1, n) = \sum_{q=1}^{q_{\max}(m_2, m_1, n)} G_n^q(m_2, m_1). \quad (\text{A.33})$$

Les ensembles $\mathcal{O}(m_2, m_1)$, étant l'union de toutes les partitions, deviendront la sommation de toutes les fonctionnelles $G_n^q(m_2, m_1)$,

$$\mathcal{O}(m_2, m_1) \rightarrow \sum_{n \in \mathcal{N}(m_2 - m_1)} \sum_{q=1}^{q_{\max}(m_2, m_1, n)} G_n^q(m_2, m_1). \quad (\text{A.34})$$

De plus, la dernière somme représente l'addition de toutes les $C_1^*(m_2, m_1, n)$ pour chaque valeur de n . On définit de cette somme, les fonctions combinatoires spéciales conjuguées de seconde espèce qui seront notées $C_2^*(m_2, m_1)$ et définies par

$$C_2^*(m_2, m_1) = \sum_{n \in \mathcal{N}(m_2 - m_1)} C_1^*(m_2, m_1, n) = \sum_{n \in \mathcal{N}(m_2 - m_1)} \sum_{q=1}^{q_{\max}(m_2, m_1, n)} G_n^q(m_2, m_1). \quad (\text{A.35})$$

On aura donc que l'homomorphisme envoie les ensembles de partitions $\mathcal{O}(m_2, m_1, n)$ et $\mathcal{O}(m_2, m_1)$ vers les fonctions combinatoires $C_1^*(m_2, m_1, n)$ et $C_2^*(m_2, m_1)$

$$\mathcal{O}(m_2, m_1, n) \rightarrow C_1^*(m_2, m_1, n) \text{ et } \mathcal{O}(m_2, m_1) \rightarrow C_2^*(m_2, m_1). \quad (\text{A.36})$$

Des équations (A.28) et (A.13), on trouve que

$$C_2^*(m_1, m_1) = G_0^1(m_1, m_1) = g_0(m_1) = 1. \quad (\text{A.37})$$

De plus, de l'équation (A.14), on trouve immédiatement que

$$C_2^*(m_2, m_1) = 0, \quad \text{si } m_2 < m_1. \quad (\text{A.38})$$

Pour le cas de l'intervalle $[8, 15]$, la fonction combinatoire prendra la forme

$$\begin{aligned} C_2^*(15, 8) = & g_2(13)g_5(8) + g_5(10)g_2(8) + g_2(13)g_2(11)g_3(8) \\ & + g_2(13)g_3(10)g_2(8) + g_3(12)g_2(10)g_2(8). \end{aligned} \quad (\text{A.39})$$

De l'équation (A.24), on trouve que les fonctions combinatoires spéciales conjuguées de seconde espèce obéissent à l'équation de récurrence

$$C_2^*(m_2, m_1) = \sum_{a_k \in \mathcal{A}} g_{a_k}(m_1) C_2^*(m_2, m_1 + a_k). \quad (\text{A.40})$$

L'équation (A.26) permet de définir, à partir des fonctions combinatoires $C_2^*(m_2, m_1)$, ce que l'on appelle les fonctions combinatoires contraintes conjuguées de seconde es-

pèce que l'on note $\bar{C}_2^*(m_2, m_1, d)$. L'équation (A.26) prendra alors la forme

$$\bar{C}_2^*(m_2, m_1, d) = \sum_{\substack{a_k \in \mathcal{A} \\ a_k > d}} g_{a_k}(m_2 - a_k) C_2^*(m_2 - a_k, m_1). \quad (\text{A.41})$$

En insérant l'équation (A.40) dans l'équation (A.41) on trouve

$$\bar{C}_2^*(m_2, m_1, d) = \sum_{\substack{a_k \in \mathcal{A} \\ a_k > d}} g_{a_k}(m_2 - a_k) \sum_{a_j \in \mathcal{A}} g_{a_j}(m_1) C_2^*(m_2 - a_k, m_1 + a_j). \quad (\text{A.42})$$

Puisque les sommation sur a_j et a_k sont indépendantes l'une de l'autre, il sera possible de les faire commuter et ainsi obtenir

$$\bar{C}_2^*(m_2, m_1, d) = \sum_{a_j \in \mathcal{A}} g_{a_j}(m_1) \sum_{\substack{a_k \in \mathcal{A} \\ a_k > d}} g_{a_k}(m_2 - a_k) C_2^*(m_2 - a_k, m_1 + a_j). \quad (\text{A.43})$$

Finalement en réutilisant l'équation (A.41), on obtient

$$\bar{C}_2^*(m_2, m_1, d) = \sum_{a_j \in \mathcal{A}} g_{a_j}(m_1) \bar{C}_2^*(m_2, m_1 + a_j, d). \quad (\text{A.44})$$

Dans le cas d'une partition sur un intervalle de longueur nulle, la fonction combinatoire $\bar{C}_2^*(m_1, m_1, d)$ ne possèdera aucune partition tel que la première part est supérieure à d à l'exception de la partition $o_0^1(m_1, m_1) \rightarrow g_0(m_1) = 1$. On aura donc que

$$\bar{C}_2^*(m_1, m_1, d) = 1. \quad (\text{A.45})$$

Dcs équations (A.38) et (A.41), on trouve que

$$\bar{C}_2^*(m_2, m_1, d) = 0, \quad \text{si} \quad m_2 < m_1. \quad (\text{A.46})$$

Par ailleurs, on peut montrer que

$$\bar{C}_2^*(m_2 + d, m_1, d) = \delta_{m_2 + d, m_1}, \quad m_2 \leq m_1, \quad d \geq 0. \quad (\text{A.47})$$

Pour démontrer cette équation, il est nécessaire d'observer les trois cas, i) $m_2 + d = m_1$, ii) $m_2 + d < m_1$ et iii) $m_2 < m_1 < m_2 + d$, séparément.

i) Pour $m_2 + d = m_1$, l'équation est vérifiée par l'équation (A.45).

ii) Pour $m_2 + d < m_1$, l'équation est vérifiée par l'équation (A.46).

iii) Pour $m_2 < m_1 < m_2 + d$, on a que la longueur de l'intervalle $[m_1, m_2 + d]$ obéit à $m_2 + d - m_1 < m_1 + d - m_1 < d$. Puisque la fonction combinatoire $\bar{C}_2^*(m_2 + d, m_1, d)$ est construite sur les partitions de l'intervalle $[m_1, m_2 + d]$ tel que la première part est supérieure à d , mais que l'intervalle est lui-même inférieur à d , on trouve qu'il n'y a aucune partition satisfaisant la condition que la première part soit supérieure à d . La fonction combinatoire $\bar{C}_2^*(m_2 + d, m_1, d)$ est donc nulle pour $m_2 < m_1 < m_2 + d$.

A.5 Solution de l'équation de récurrence inversée

Dans cette section, la preuve de la solution générale de l'équation (A.1) satisfaisant les conditions frontières (A.2) sera présentée.

Théorème 1. *La solution générale de l'équation (A.1) satisfaisant aux conditions frontières (A.2) est donnée par*

$$b_m = \sum_{j=0}^{a_N-1} \bar{C}_2^*(M+j, m, j) \lambda_{M+j}, \quad (\text{A.48})$$

où $M \geq m + 1 - a_N$, mais autrement arbitraire avec a_N étant la plus grande part de \mathcal{A} .

Démonstration. Il faut d'abord montrer que (A.48) est bien une solution de (A.1) et montrer, par la suite, que (A.48) reproduit les conditions frontières de l'équation (A.2).

1) Pour ce faire, on insère l'équation (A.44) dans l'équation (A.48)

$$b_m = \sum_{j=0}^{a_N-1} \sum_{a_k \in \mathcal{A}} g_{a_k}(m) \bar{C}_2^*(M+j, m+a_k, j) \lambda_{M+j}. \quad (\text{A.49})$$

Puisque les sommes sur j et a_k sont indépendantes, on peut les faire commuter pour obtenir

$$b_m = \sum_{a_k \in \mathcal{A}} g_{a_k}(m) \sum_{j=0}^{a_N-1} \bar{C}_2^*(M+j, m+a_k, j) \lambda_{M+j}. \quad (\text{A.50})$$

Finalement, en réutilisant l'équation (A.48), on obtient

$$b_m = \sum_{a_k \in \mathcal{A}} g_{a_k}(m) b_{m+a_k}. \quad (\text{A.51})$$

On voit alors que (A.48) est bel et bien solution de l'équation (A.1).

2) On évalue l'équation (A.48) pour $m = M+k$ avec $0 \leq k < a_N$

$$b_{M+k} = \sum_{j=0}^{a_N-1} \bar{C}_2^*(M+j, M+k, j) \lambda_{M+j}. \quad (\text{A.52})$$

De l'équation (A.47), on trouve que

$$b_{M+k} = \sum_{j=0}^{a_N-1} \delta_{M+j, M+k} \lambda_{M+j} = \lambda_{M+k}. \quad (\text{A.53})$$

On retrouve alors les conditions frontières (A.2). □

A.6 Conclusion

Dans cette annexe, la résolution d'une équation linéaire homogène à coefficients variables a été présentée en détails. Tout d'abord, la notion de partition ordonnée fut élaborée. Celles-ci forment les éléments de base sur quoi les fonctions combinatoires sont construites. Par la suite, différents ensembles de partitions et leurs relations fût présentés. Ensuite, on a introduit un homomorphisme H permettant de construire les

fonctions combinatoires sur les ensembles de partitions et de transformer les équations reliant ces ensembles à des équations de récurrence entre les nombreuses fonctions combinatoires. Pour finir, la solution en terme de fonctions combinatoires satisfaisant aux conditions initiales fût donnée.

Annexe B

Symboles de Pochhammer

Les symboles de Pochhammer descendant et ascendant sont aussi appelés factorielle descendante et factorielle ascendante. On dénote le symbole de Pochhammer descendant par $x^{(n)}$ et de façon analogue, le symbole de Pochhammer ascendant par $x^{[n]}$. Ceux-ci sont définis par

$$x^{(n)} = \prod_{i=1}^n (x + 1 - i) = \frac{\Gamma(x + 1)}{\Gamma(x - n + 1)}, \quad (\text{B.1})$$

$$x^{[n]} = \prod_{i=1}^n (x - 1 + i) = \frac{\Gamma(x + n)}{\Gamma(x)}, \quad (\text{B.2})$$

où $\Gamma(x)$ est la fonction Gamma définie par

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty y^{x-1} e^{-y} dy. \quad (\text{B.3})$$

On note que pour un argument entier, la fonction Gamma se réduit à la factorielle standard comme

$$\Gamma(m + 1) = m! \quad (\text{B.4})$$

et donc, que les symboles de Pochhammer pour un argument entier m deviennent

$$m^{(n)} = \frac{m!}{(m - n)!} \text{ et } m^{[n]} = \frac{(m + n - 1)!}{(m - 1)!}. \quad (\text{B.5})$$

Ces dernières équations justifient les appellations factorielle descendante et ascendante. Il est également possible d'exprimer le symbole de Pochhammer descendant en terme du symbole de Pochhammer ascendant et vice-versa. En effectuant le changement d'indice $i' = n + 1 - i$, le symbole de Pochhammer descendant peut s'écrire comme

$$\begin{aligned} x^{(n)} &= \prod_{i=1}^n (x + 1 - i) = \prod_{i'=1}^n (x + 1 - (n + 1 - i')) \\ &= \prod_{i'=1}^n ((x - n + 1) - 1 + i') = (x - n + 1)^{[n]}. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Avec le même changement d'indice, on trouve pour le symbole de Pochhammer ascendant que

$$\begin{aligned} x^{[n]} &= \prod_{i=1}^n (x - 1 + i) = \prod_{i'=1}^n (x - 1 + (n + 1 - i')) \\ &= \prod_{i'=1}^n ((x + n - 1) + 1 - i') = (x + n - 1)^{(n)}. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Annexe C

Fichier *Mathematica*

Dans cette annexe, on présente les fichiers *Mathematica* contenant les algorithmes servant à calculer les coefficients $K_r^{(N)}(\rho, l)$.

Dans un premier temps, la fonction servant à trouver les valeurs des fonctions de structure est appelée `β Creation` et elle prend en argument `m2` désignant la limite supérieure des fonctions de structure, `m1` représentant le commencement des partitions de la fonction de structure et `l`. Ces trois paramètres peuvent être associés respectivement aux valeurs de N , s et l de l'équation (5.14).

Cette fonction retourne ensuite un tableau des valeurs allant de $\lfloor m2/3 - 2 \rfloor$ à `m2` pour n , de 0 à `m2` pour p_1 et de `m2 - m1 - 3` à `m2 - m1` pour m_2 . À première vue, ces choix de valeurs peuvent sembler arbitraires, mais ils sont en réalité choisis afin de minimiser la mémoire nécessaire à l'entreposage des fonctions de structure.

```

(*Calcul des fonctions de structure conjuguées de la forme  $\beta^*_1(m_2, m_1; n, p_1)$ *)
 $\beta$ Creation[m2_, m1_, l_] := (
   $\beta$ temp = Table[0, {itn, 2}, {itp1, 0, m2 - m1}, {itm2, m1, m2}];
  (*Création de deux tableaux vides (initialisés à 0) de dimension  $(m_2 - m_1 + 1)$ 
   $\times (m_2 - m_1)$  *)

   $\beta$  = {}; (*Création d'un tableau vide pour entreposer les données finales*)

   $\beta$ temp[[1, 1, 1]] = 1; (*Initialisation de la fonction de structure de
  longueur nulle*)

  (*Calcul des fonctions de structure pour  $n > 0$ *)
  For[itn = 1, itn ≤ m2 - m1, itn++,
    (*Initialisation des variables qui interchange l'utilisation des deux
    tableaux  $\beta$ temp*)
    nancient = Mod[itn - 1, 2] + 1;
    nprochain = Mod[itn, 2] + 1;
    (*Itération sur chacune des valeurs de itp1 entre 0 et  $m_2 -$ 
     $m_1$  et itm2 entre  $m_1$  et  $m_2$  *)
    For[itp1 = 0, itp1 ≤ m2 - m1, itp1++,
      For[itm2 = m1, itm2 ≤ m2, itm2++,
         $\beta$ temp[[nprochain, itp1 + 1, itm2 - m1 + 1]] =
          If[itp1 != 0 && itm2 - m1 > 0,  $\beta$ temp[[nancient, itp1, itm2 - m1]], 0] +
          If[itm2 - m1 > 1,  $\beta$ temp[[nancient, itp1 + 1, itm2 - m1 - 1]], 0] +
          If[itm2 - m1 > 2, itm2 * (itm2 + 2 * 1 + 1)  $\beta$ temp[[nancient, itp1 + 1, itm2 - m1 - 2]],
          0]; (*Évaluation des valeurs de  $\beta$  à l'aide de l'équation de récurrence*)
      ];
    ];
  ];

  (*Ajout des valeurs de  $\beta$ temp pertinentes à  $\beta$ *)
  If[itn > Floor[m2 / 3 - 2] && itn < m2,
    AppendTo[ $\beta$ ,  $\beta$ temp[[nprochain, 1 ;; m2 - m1 + 1, m2 - m1 - 2 ;; m2 - m1 + 1]]];
    (*Ajout des valeurs de  $\beta$ temp pour toutes les valeurs de n entre  $m_2/3 -$ 
    2 et m2 et de toutes les valeurs de m2 entre  $m_2 - m_1 - 3$  et  $m_2 - m_1$  *)
  ];
];
(*Retour d'un tableau contenant les valeurs de  $\beta$  pertinentes*)
Return[ $\beta$ ];
)

```

La fonction `CoeffAiry` a pour but de calculer les $n + 1$ premiers coefficients d'Airy. La fonction utilise l'équation de récurrence (2.39) et les conditions initiales (2.40) afin de calculer de façon efficace les coefficients d'Airy. On notera que bien qu'il existe une forme fermée des coefficients d'Airy donnée par (2.41), il est tout de même plus rapide d'utiliser l'équation de récurrence lorsque l'on cherche l'ensemble de tout les premiers coefficients et non un seul coefficient en particulier. La fonction retourne les valeurs des coefficients sous la forme d'une liste de $n + 1$ éléments.

```
(*Calcul des coefficients d'Airy jusqu'à une valeurs n*)
CoeffAiry[n_] := (
  Airy = {1 / (3^(2/3) * Gamma[2/3]), -1 / (3^(1/3) * Gamma[1/3]), 0};
  (*Définition des trois premiers coefficients*)
  For[itAiry = 3, itAiry ≤ n, itAiry++,
    AppendTo[Airy, Airy[[itAiry - 2]] / ((itAiry) * (itAiry - 1))];
    (*Calcul des coefficients d'Airy à l'aide de l'équation de récurrence*)
  ];
  Return[Airy];
)
```

La fonction **CoeffKrN** a pour but de calculer les valeurs des $r + 1$ premiers coefficients $K_r^{(N)}(\rho, l)$ définis à l'équation (5.14). La fonction prend en paramètre n représentant la valeur de N , r déterminant le dernier coefficient qui est calculé, ρ représentant la constante de couplage du problème et l le nombre quantique orbital. La fonction renvoie une liste des $r + 1$ premiers coefficients $K_r^{(N)}(\rho, l)$.

```
(*Calcul des coefficients  $K_r^{(N)}$  ( $\rho, l$ ) pour  $N=n$  et pour tout  $r \leq r$ *)
CoeffKrN[n_, r_, l_, rho_] := (
  m2 = Length[beta[[1, 1]]] - 1; (*Initialisation de la longueur de la fonction
    de structure maximale*)
  a = CoeffAiry[n + r + l + 3]; (*Entreposage des coefficients d'Airy utile au calcul*)
  coeff = Table[0, {i, 0, r}]; (*Initialisation du tableau des coefficients*)
  (*Création des différents coefficients pour chaque valeur de r*)
  For[i = 0, i <= r, i++,
    coefftemp = {0, 0}; (*Initialisation de la variable d'entreposage
      temporaire des coefficients*)
    (*Somme sur s*)
    For[its = 0, its <= 1, its++,
      (*Somme sur  $\mu$  pour i=0*)
      For[mu = 0, mu <= i - 1, mu++,
        temp = 0; (*Initialisation d'une variable de calcul temporaire*)
        LInterval = n - 1 - its - mu - 3*Mod[n - 1 - its - mu, 2];
        (*Calcul de la longueur de l'intervalle réduit*)
        (*Somme sur v*)
        For[v = 0, v <= Floor[LInterval/6], v++,
          nParts = (n - 1 - its + mu - 2*v - Mod[n - 1 - its - mu, 2]) / 2;
          (*Calcul de la valeur de n (nombre de parts)*)
          If[LInterval == 6*v, rhoTemp = 1, rhoTemp = rho^(LInterval/2 - 3*v)];
          (*Vérification de la valeur de  $\rho^{P2}$ *)
          temp += rhoTemp*beta[[its + 1, nParts - Floor[m2/3 - 2], mu + 1, n - 1 - m2 + its + 3]]*
            a[[n + l + i - mu + 1]]*Binomial[n + l + i - mu, i - 1 - mu];
        ];
        coefftemp[[its + 1]] += (-1)^(i - 1 - mu)*temp;
      ];
    ];
  ];
```

```

(*Somme pour i=1 et somme sur j*)
For[itj = 0, itj ≤ 1, itj++,
  For[μ = 0, μ ≤ itr, μ++,
    temp = 0; (*Initialisation d'une variable de calcul temporaire*)
    LInterval = n + itj - 2 - its - μ - 3*Mod[n + itj - 2 - its - μ, 2];
    (*Calcul de la longueur de l'intervalle réduit*)
    For[v = 0, v ≤ Floor[LInterval/6], v++,
      nParts = (n + itj - 2 - its + μ - 2*v - Mod[n + itj - 2 - its - μ, 2]) / 2;
      (*Calcul de la valeur de n (nombre de parts)*)
      temp += ρ^(LInterval/2 - 3*v + 1) * β[[its + 1, nParts - Floor[m2/3 - 2],
        μ + 1, n + itj - 2 - m2 + its + 3]] * a[[n + itj + 1 + 1 + itr - μ + 1]] *
        Binomial[n + itj + 1 + 1 + itr - μ, itr - μ];
    ];
    coefftemp[[its + 1]] += (-1)^(itr - μ) * temp;
  ];
];

(*Somme pour i=2 et somme sur j*)
For[itj = 0, itj ≤ 2, itj++,
  For[μ = 0, μ ≤ itr, μ++,
    temp = 0; (*Initialisation d'une variable de calcul temporaire*)
    LInterval = n + itj - 3 - its - μ - 3*Mod[n + itj - 3 - its - μ, 2];
    (*Calcul de la longueur de l'intervalle réduit*)
    For[v = 0, v ≤ Floor[LInterval/6], v++,
      nParts = (n + itj - 3 - its + μ - 2*v - Mod[n + itj - 3 - its - μ, 2]) / 2;
      (*Calcul de la valeur de n (nombre de parts)*)
      If[LInterval == 6*v, ptemp = 1, ptemp = ρ^(LInterval/2 - 3*v)];
      (*Vérification de la valeur de ρF2*)
      temp += (n + itj) * (n + itj + 2*1 + 1) * ptemp *
        β[[its + 1, nParts - Floor[m2/3 - 2], μ + 1, n + itj - 3 - m2 + its + 3]] *
        a[[n + itj + 1 + 1 + itr - μ + 1]] * Binomial[n + itj + 1 + 1 + itr - μ, itr - μ];
    ];
    coefftemp[[its + 1]] += (-1)^(itr - μ) * temp;
  ];
];
];
coeff[[itr + 1]] = ρ * coefftemp[[1]] / (2*1 + 2) + coefftemp[[2]];
];
Return[coeff]
)

```